

Isotopleverschiebung im Xenon I-Spektrum und Kerndeformation der stabilen Xenon-Nuklide

**INAUGURAL DISSERTATION
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Philipps-Universität Marburg/Lahn**

**vorgelegt von
Hans-Jürgen Schäfer
aus Marburg**

Marburg/Lahn 1973

1974

**Isotopieverschiebung im
Xenon I-Spektrum und Kerndeformation
der stabilen Xenon-Nuklide**

**INAUGURAL DISSERTATION
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Philipps-Universität Marburg/Lahn**

**vorgelegt von
Hans-Jürgen Schäfer
aus Marburg**

Marburg/Lahn 1973



Vom Fachbereich Physik der
Philipps-Universität Marburg/Lahn als

Dissertation angenommen am 21.12.1973

Tag der mündlichen Prüfung: 8.1.1974

Berichterstatter: Prof. Dr. H. Hühnermann

Mitberichterstatter: Prof. Dr. G. Grawert

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1. <u>Einleitung und Problemstellung</u>	3
2. <u>Xenon-Isotope und Xenon-Spektrum</u>	
2.1 Eigenschaften der stabilen Xenon-Isotope	6
2.2 Feinstruktur und Wahl der untersuchten Übergänge	9
2.3 Hyperfeinstruktur der untersuchten Übergänge	13
3. <u>Experimentelles</u>	
3.1 Meßmethode	17
3.2 Elektromagnetische Isotopentrennung	19
3.3 Anregung der Spektrallinien	
3.3.1 Beschreibung der Lichtquelle	23
3.3.2 Füllung der Entladungslampe	24
3.3.3 Anregungsbedingungen	25
3.4 Registrierung der Hyperfeinstruktur	26
4. <u>Auswertung der Messungen und Meßergebnisse</u>	
4.1 Auswerteverfahren	29
4.2 Auswertung der einzelnen Meßserien	33
4.3 Ausgleichsrechnung	37
5. <u>Theorie der Isotopieverschiebung</u>	38
5.1 Der massenabhängige Effekt der Isotopie- verschiebung	40
5.2 Der volumenabhängige Effekt der Isotopie- verschiebung	44
5.3 Der Einfluß der Kernladungsverteilung auf den Volumeneffekt der Isotopieverschiebung	47
6. <u>Interpretation und Diskussion der Meßergebnisse</u>	
6.1 Vergleich der Meßergebnisse mit Hilfe des King-Diagramms	55

6.2 Abschätzung des spezifischen Masseneffekts	60
6.2.1 Abschätzung des spezifischen Masseneffekts durch Vergleich der ISV im Xenon I- und Barium II-Spektrum	60
6.2.2 Abschätzung der Kopplungsintegrale	63
6.2.3 Beziehung zwischen Volumeneffekt der ISV und der Kern-Bindungsenergie	66
6.3 Die experimentelle Isotopieverschiebungskonstante	69
6.4 Die Änderung des mittleren quadratischen Ladungsradius	78
6.5 Kerndeformation	83
6.6 Odd-even-staggering	96
6.7 Ausblick	100
7. <u>Anhang</u>	
7.1 Zur Berechnung der Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichten	102
7.2 Verzeichnis häufig benutzter Abkürzungen und Symbole	106
7.3 Tabellenverzeichnis	108
7.4 Figurenverzeichnis	110
7.5 Literaturverzeichnis	111

<u>Zusammenfassung</u>	116
------------------------	-----

Lebenslauf

Atomos nec colorem nec odorem
nec sucum nec frigus nec calorem
habent.

Lucretius [Luc-55]

1. EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG

Die Untersuchung von Atomspektren gestattet bekanntlich nicht nur, Eigenschaften der Elektronenhülle der Atome zu bestimmen, sondern kann auch Information über die Atomkerne liefern. So können aus der Hyperfeinstruktur(Hfs)-Aufspaltung einer Spektrallinie der Kernspin und Kernmomente bestimmt werden. Neben der Aufspaltung der Spektrallinien beobachtet man ferner, daß die Schwerpunkte der Linien verschiedener Isotope eines Elements nicht zusammenfallen, sondern vielmehr gegeneinander verschoben sind. Dieser als Isotopieverschiebung(ISV) bekannte Effekt läßt sich ebenfalls auf bestimmte Eigenschaften der Atomkerne zurückführen, nämlich:

- die endliche Kernmasse, die zu einer Kernmitbewegung im Atom führt,
- die endliche Ausdehnung der Kernladung, die eine Abweichung des Kernpotentials vom reinen Coulomb-Potential einer punktförmigen Kernladung zur Folge hat.

Entsprechend diesen Ursachen unterscheidet man einen massenabhängigen und einen volumenabhängigen Effekt der Isotopieverschiebung, kurz "Masseneffekt"(ME) bzw. "Volumeneffekt"(VE) genannt. Der Masseneffekt nimmt erfahrungsgemäß mit wachsender Massenzahl rasch ab, während der Volumeneffekt bei den leichten Elementen klein ist, aber bei den schwereren Elementen dominiert.

Für den Volumeneffekt findet man eine Proportionalität zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Hüllenelektronen am Kernort, weshalb nur s- (und $p_{1/2}$ -) Elektronen merklich zu diesem Effekt beitragen können. Diese tauchen gewissermaßen als Sonden in den Kern ein und "messen" die Differenz des elektrostatischen Potentials isotoper Kerne, die sich in einem Unterschied in der potentiellen Energie der Elektronen äußert [Hum 52, Kop 56]. Bodmer [Bod 53, Bod 58] konnte zeigen, daß diese Energiedifferenz außer von einem elektronischen Faktor und der Kernladungszahl Z nur vom mittleren quadratischen Radius der Kernladungsverteilung und dessen Änderung von einem Isotop zum anderen abhängig ist. Die Untersuchung des Volumeneffekts der ISV bietet

daher die Möglichkeit, die Änderung der Kernladungsverteilung in Abhängigkeit von der Neutronenzahl zu messen, und kann so zum Verständnis der Struktur der Atomkerne beitragen.

Der Zusammenhang zwischen Kernstruktur und ISV wurde vielfach untersucht (vgl. z.B. die zusammenfassenden Artikel von Stacey [Sta 66] sowie Golovin und Striganov [GS 68]), wobei man auf einige Unregelmäßigkeiten im Gang der ISV stieß, wie etwa die unerwartet großen Änderungen der Kernradien in der Umgebung der magischen Neutronenzahlen $N = 50, 82$ und 126 oder das Phänomen des sogenannten "odd-even-staggering" zwischen Isotopen mit gerader und ungerader Neutronenzahl.

Erst ein möglichst umfangreiches Datenmaterial für eine möglichst große Zahl von Isotopen der einzelnen Elemente gestattet eine systematische Untersuchung solcher Effekte. Sofern nicht die Möglichkeit gegeben ist, die ISV von Radio-Nukliden zu messen, hat man sich allerdings auf die Untersuchung von Elementen gerader Kernladungszahl Z zu beschränken, da nur diese eine größere Zahl stabiler Isotope (bis zu 10 im Falle von Zinn) besitzen, während man bei den "ungeraden" Elementen nicht mehr als 2 stabile Isotope findet.

In unmittelbarer Nähe der magischen Neutronenzahl $N=82$ eignet sich das Element Xenon mit seinen 9 stabilen Isotopen besonders gut dazu, die Abhängigkeit des Volumeneffekts von der Neutronenzahl näher zu untersuchen; in diesem Fall sollte es möglich sein, die Änderung des Kernladungsradius und Einflüsse der Kerndeformation über eine Neutronenzahldifferenz von $\Delta N=12$ zu verfolgen.

In Erweiterung der Messungen am Lanthan [Man 72, FHM 73], Barium [Hüh 71, FHH 73], Cäsium [HW 67, HW 68] und Xenon [Sch 70, FHK 71] wurden mit dieser Arbeit die Untersuchungen auf die seltenen Xenon-Isotope ausgedehnt, mit dem Ziel, möglichst umfassende und zuverlässige Aussagen über Kernradius-Änderungen in der Umgebung einer magischen Neutronenzahl zu gewinnen.

Zwar war schon früher die ISV der stabilen Xenon-Isotope von

anderen Autoren untersucht worden, zuerst von Koch und Rasmussen [KR 50] und in jüngster Zeit von Jackson und Coulombe [JC 70a, JC 71] sowie Vetter [Vet 70a, Vet 72], doch blieben auch nach diesen Arbeiten immer noch einige Fragen hinsichtlich der Systematik der ISV im Xenon-Spektrum offen. So untersuchten Jackson und Coulombe zwar die ISV in 30 Xenon-Spektrallinien, jedoch fehlten Messungen der seltenen Isotope ^{124}Xe und ^{126}Xe (inzwischen wurde auch von diesen Autoren mit der Untersuchung der seltenen Xenon-Isotope begonnen [D.A.Jackson: private Mitteilung]). Vetter wiederum konnte die ISV der beiden seltenen Xenon-Isotope wegen der geringen Substanzmengen, die ihm zur Verfügung standen, nur an einer einzigen Spektrallinie (einem Laser-Übergang der Wellenlänge $\lambda=3,99\text{ }\mu\text{m}$) messen. Ferner konnten Jackson und Coulombe ihre Messungen zunächst nicht zwanglos deuten und vermuteten weitere, bisher nicht bekannte Unregelmäßigkeiten der ISV gefunden zu haben [JC 70b]. Es erschien daher lohnend, unabhängige ISV-Messungen an den stabilen Xenon-Isotopen durchzuführen, um den offenen Fragen nachzugehen und einige der Lücken im vorhandenen Zahlenmaterial zu schließen.

2. XENON-ISOTOPE UND XENON-SPEKTRUM

2.1 Eigenschaften der stabilen Xenon-Isotope

Das Element Xenon besteht im natürlichen Isotopengemisch aus 9 stabilen Isotopen, deren relative Häufigkeiten zwischen 0,09% (^{126}Xe) und 26,89% (^{132}Xe) liegen [Nie 50]*).

Bis auf ^{129}Xe und ^{131}Xe besitzen alle stabilen Xenon-Isotope sowohl eine gerade Anzahl von Protonen ($Z=54$) als auch eine gerade Anzahl von Neutronen (sogenannte (g,g)-Kerne) und haben daher im Grundzustand den Kerndrehimpuls $\vec{I} = 0$. Die Kerndrehimpulsquantenzahlen für die Grundzustände der beiden Xenon-Isotope mit ungerader Neutronenzahl ((g,u)-Kerne) sind $I(^{129}\text{Xe})=1/2$ bzw. $I(^{131}\text{Xe})=3/2$. Für diese beiden Isotope können die magnetischen Kerndipolmomente μ_I gemessen werden; Kernresonanz-Untersuchungen von Brinkmann [Bri 68] lieferten, einschließlich der diamagnetischen Korrekturen nach [FC 69], die Werte:

$$\begin{aligned} \mu_I(^{129}\text{Xe}) &= -0,77682(22) \mu_K \\ \text{und} \\ \mu_I(^{131}\text{Xe}) &= +0,69083(19) \mu_K \end{aligned} \quad (2.1)$$

(μ_K : Kernmagneton) .

Für ^{131}Xe kann außerdem wegen $I > 1/2$ auch ein spektroskopisches Quadrupolmoment Q_I (vgl. z.B. [Kop 56]) gemessen werden, das von Faust und McDermott [FM 61] mit Hilfe der Atomstrahl-Radiofrequenzmethode zu

$$Q_I(^{131}\text{Xe}) = -0,120(12) \cdot 10^{-24} \text{cm}^2 \quad (2.2)$$

bestimmt wurde.

*) Neuere Messungen der relativen Isotopenhäufigkeiten mit einem elektrischen Massenfilter [BGZ 67] sind, abgesehen von einer geringen Abweichung für ^{136}Xe , mit den Messungen von [Nie 50] in Übereinstimmung.

Schließlich gehört ^{131}Xe zu den wenigen (g,u)-Kernen, für die ein magnetisches Kernoktupolmoment Ω_I gemessen werden konnte; Faust und McDermott ermittelten den Wert

$$\Omega_I(^{131}\text{Xe}) = +0,048(12) \mu_K \cdot 10^{-24} \text{cm}^2. \quad (2.3)$$

Für das Verständnis der Kernstruktur sind auch Eigenschaften der angeregten Kernzustände der Nuklide von Bedeutung (vgl. z.B. [Her 61]), daher seien hier kurz einige Daten dieser Zustände angemerkt: der erste angeregte Zustand der stabilen geraden Xenon-Isotope besitzt ausnahmslos den Kernspin $I=2$ und die Parität $\pi=+1$; die Anregungsenergie nimmt stetig mit der Neutronenzahl zu und erreicht einen Wert von $E(2^+)=1,32$ MeV für das Nuklid mit der magischen Neutronenzahl $N=82$, nämlich für ^{136}Xe (der Zusammenhang zwischen Anregungsenergie und Kernstruktur wird später bei der Diskussion der Deformationseffekte, Abschnitt 6.5, noch eine Rolle spielen).

Die wichtigsten Daten für die stabilen Xenon-Isotope sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1

Einige charakteristische Daten der stabilen Xenon-Isotope

Massen- zahl	Neutro- nen- zahl	relative Häufig- keit a)	Grundzustand des Kerns			erster angeregter Zustand	
			Kernspin und Parität b)	magn. Kern- dipolmoment	elektr. Kern- quadrupol- moment	Kernspin und Parität b)	Anregungs- energieb)
A	N	H / 10 ⁻²	I ^π	μ_I / μ_K	$Q_I / 10^{-24} \text{ cm}^2$	I ^π	E / keV
124	70	0,096(1)	0 ⁺			2 ⁺	350
126	72	0,090(1)	0 ⁺			2 ⁺	386
128	74	1,919(4)	0 ⁺			2 ⁺	441
129	75	26,44(8)	1/2 ⁺	-0,77682(22) ^{c)}			
130	76	4,08(1)	0 ⁺			2 ⁺	538
131	77	21,18(5)	3/2 ⁺	+0,69083(19) ^{c)}	-0,120(12) ^{d)}		
132	78	26,89(7)	0 ⁺			2 ⁺	667,8
134	80	10,44(2)	0 ⁺			2 ⁺	850
136	82	8,87(1)	0 ⁺			2 ⁺	1320

a) relative Isotopenhäufigkeit im natürlichen Isotopengemisch nach [Nie 50], siehe auch Fußnote Seite 6;

b) nach [LHP 67]; c) nach [Bri 68], diamagnetisch korrigiert [FC 69]; d) nach [FM 61]

2.2 Feinstruktur und Wahl der untersuchten Übergänge

Die Edelgase sind charakterisiert durch abgeschlossene Elektronenschalen der atomaren Grundzustände. Im Falle von Xenon besitzt der Grundzustand die Konfiguration $5p^6 \ ^1S_0$. Die angeregten Zustände $5p^5 nl$ können als Terme eines Zweielektronen-Spektrums aufgefaßt werden, da das angeregte nl -Elektron mit dem von ihm in der $5p$ -Schale zurückgelassenen Loch wie mit einem $5p$ -Positron wechselwirkt.

Ebenso wie bei den anderen Edelgasen ist auch hier die elektrostatische Wechselwirkung zwischen dem äußeren angeregten Elektron und dem Rumpf der Hülle schwächer als die Spin-Bahn-Wechselwirkung innerhalb des Rumpfes, andererseits aber stärker als die Spin-Bahn-Kopplung des nl -Elektrons. Diese von der reinen jj - oder LS -Kopplung abweichende Form der intermediären Kopplung wird am besten in einem $(jl)k$ -Schema beschrieben:

Der Gesamtdrehimpuls $\vec{j}$ des Parent-Terms $5p^5 P_j$ koppelt mit dem Bahndrehimpuls $\vec{l}$ des äußeren Elektrons zum Drehimpuls $\vec{k}$

$$\vec{k} = \vec{j} + \vec{l} \quad ,$$

und dieser koppelt mit dem Spin $\vec{s}$ des äußeren Elektrons zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ der Hülle

$$\vec{J} = \vec{k} + \vec{s} \quad .$$

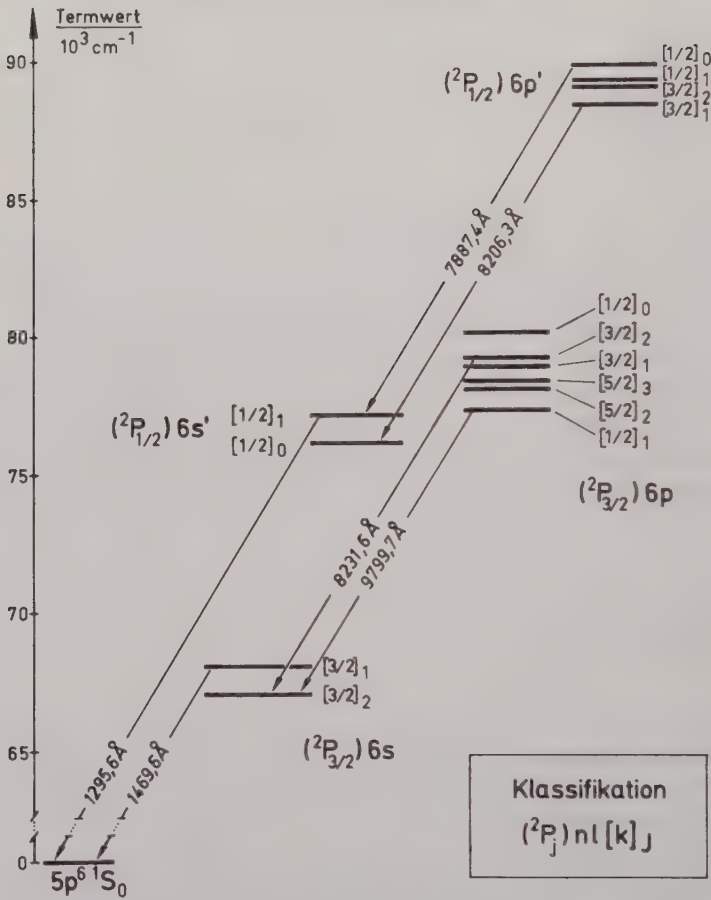
Entsprechend diesen Kopplungsverhältnissen bilden die Terme der Konfiguration $5p^5 nl$ zwei deutlich getrennte Gruppen, die jeweils auf einem Term des Dubletts $5p^5 \ ^2P_{1/2, 3/2}$ des Xe^+ -Ions aufbauen.

Die vollständige Term-Klassifikation in dem genannten $(jl)k$ -Schema lautet für die Xenon I-Terme in der von Racah [Rac 42] vorgeschlagenen Notierung:

$$5p^5 \ (^2P_j) \ nl[k]_J$$

mit $j=1/2, 3/2$ und j, k, J : Quantenzahlen der oben genannten Drehimpulse $\vec{j}, \vec{k}, \vec{J}$.

Xenon I - Termschema



Figur 1: Ausschnitt aus dem Xenon I-Termschema

In einer abgekürzten Schreibweise werden üblicherweise die zur Parent-Konfiguration $5p^5 \ ^2P_{1/2}$ gehörigen Terme zur Unterscheidung von den auf $5p^5 \ ^2P_{3/2}$ aufbauenden Termen mit einem Apostrroph gekennzeichnet, also

$$nl'[k]_J \quad \text{für} \quad 5p^5 ({}^2P_{1/2}) \ nl[k]_J \quad .$$

Figur 1 zeigt einen Ausschnitt aus dem Xenon I-Termschema mit den von uns untersuchten Übergängen sowie den beiden Resonanzlinien.

Ziel der Untersuchungen war es (wie in Kapitel 1. erläutert) möglichst genaue Aussagen über Kernradiusänderungen insbesondere zwischen den seltenen Xenon-Isotopen zu gewinnen. Es mußten daher aus dem Spektrum geeignete Linien ausgewählt werden, die eine sichere Bestimmung solcher Effekte auch bei Verwendung kleinster Substanzmengen zulassen. Die Auswahl erfolgte nach folgenden Kriterien:

- 1) möglichst großer Volumeneffekt der ISV,
- 2) möglichst intensiver Übergang,
- 3) möglichst kleine Halbwertsbreite der Spektrallinie,
- 4) möglichst vollständig aufgelöste Hyperfeinstruktur der ungeraden Isotope,
- 5) keine Störung durch Nachbarlinien des Xenon-Spektrums oder durch Fremdgas-Linien.

Nicht alle diese Bedingungen konnten gleichzeitig erfüllt werden; es wurden jedoch 4 Übergänge ausgesucht, die diesen Forderungen sehr nahe kommen, und zwar die Übergänge

$$\begin{aligned} 6p'[1/2]_0 - 6s'[1/2]_1, \quad \lambda &= 7887 \text{ \AA}; \\ 6p'[3/2]_1 - 6s'[1/2]_0, \quad \lambda &= 8206 \text{ \AA}; \\ 6p[3/2]_2 - 6s[3/2]_2, \quad \lambda &= 8231 \text{ \AA}; \\ \text{und } 6p[1/2]_1 - 6s[3/2]_2, \quad \lambda &= 9799 \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Bei allen 4 Linien handelt es sich um Übergänge, an denen ein 6s-Elektron beteiligt ist; sie lassen wegen der endlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit von s-Elektronen am Kernort einen verhältnismäßig großen Volumeneffekt erwarten (Kriterium 1). Ebenso erfüllen diese Linien die Bedingung 3; sie gehören nämlich zu den langwelligeren der 6p-6s-Übergänge und sollten eine geringere Dopplerverbreiterung zeigen als die im blauen Spektralbereich liegenden 6p-6s-Übergänge, da im Wellenzahlmaßstab die Dopplerbreite einer Spektrallinie bekanntlich proportional zur Wellenzahl $\nu=1/\lambda$ des Übergangs ist. Die beiden Übergänge $\lambda=7887\text{\AA}$ und $\lambda=8206\text{\AA}$ gehören zwar zu den schwächeren Übergängen im nahen Infrarot, besitzen andererseits aber eine einfache Hyperfeinstruktur, nämlich 2 Hfs-Komponenten für ^{129}Xe ($I=1/2$) bzw. 3 Hfs-Komponenten für ^{131}Xe ($I=3/2$), mit verhältnismäßig großer Hfs-Aufspaltung von $\Delta\nu_{\text{Hfs}}(^{129}\text{Xe}) \approx 290\text{mK}^*$ für $\lambda=7887\text{\AA}$ und $\Delta\nu_{\text{Hfs}}(^{129}\text{Xe}) \approx 220\text{mK}$ für $\lambda=8206\text{\AA}$ [BKR 52]. Eine kompliziertere Hfs zeigen die beiden anderen Linien $\lambda=8231\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$, weil jeweils beide Terme des Übergangs aufspalten. Hier konnte jedoch ausgenutzt werden, daß beide Übergänge zu dem Term $6s[3/2]_2$ führen, dessen Hfs sehr genau aus Atomstrahl-Radiofrequenzmessungen von Faust und McDermott [FM 61] bekannt ist (vgl. Abschnitt 2.3) und somit bei der Auswertung unserer Messungen zu Grunde gelegt werden kann.

Da die Übergänge $\lambda=8231\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$ sowie $\lambda=8206\text{\AA}$ auf die metastabilen Elektronenzustände $6s[3/2]_2$ bzw. $6s'[1/2]_0$ führen, ist zu erwarten, daß in diesen Linien Selbstabsorption auftreten wird, wodurch die Auswertung der Messungen verfälscht werden kann. Der Einfluß der Selbstabsorption (Selbstumkehr) konnte jedoch durch geeignete Anregungsbedingungen gering gehalten werden und wurde zudem bei der Hfs-Analyse berücksichtigt (vgl. Abschnitt 3.3 und 4.2).

*) Hfs-Aufspaltungen werden ebenso wie die Linienbreite oder die ISV in der optischen Spektroskopie üblicherweise in Wellenzahldifferenzen $\Delta\nu$ angegeben. Als Einheit für ν bzw. $\Delta\nu$ hat sich das Kayser(K) bzw. Milli-Kayser(mK)

$$1 \text{ K} = 1 \text{ cm}^{-1}$$

eingebürgert. Da eine Verwechslung mit der Einheit "Kelvin" in diesem Zusammenhang ausgeschlossen ist, wird auch in dieser Arbeit anstelle von 10^{-3}cm^{-1} die bequemere Schreibweise mK benutzt.

2.3 Hyperfeinstruktur der untersuchten Übergänge

Neben der ISV, die der eigentliche Gegenstand dieser Untersuchungen ist, tritt für die ungeraden Xenon-Isotope mit Kern-drehimpulsquantenzahl $I > 0$ eine Hfs-Aufspaltung der Feinstrukturterme auf, falls der Hüllendrehimpuls $\vec{J}$ von Null verschieden ist. Ein Hfs-Term mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl $F = I+J, I+J-1, \dots, |I-J|$ erhält auf Grund der Hfs-Wechselwirkung des Atomkerns mit der Elektronenhülle eine Zusatzenergie ΔE_{Hfs} , die sich als

$$\Delta E_{\text{Hfs}}/hc = \begin{cases} A \cdot d(I, J; F) & \text{für } I=1/2, J > 0 \\ A \cdot d(I, J; F) + B \cdot q(I, J; F) & \text{für } I, J > 1/2 \end{cases} \quad (2.4)$$

schreiben läßt, sofern man lediglich die magnetische Dipolwechselwirkung und die elektrische Quadrupolwechselwirkung berücksichtigt^{*)}; dabei bedeutet:

h : Plancksches Wirkungsquantum

c : Lichtgeschwindigkeit

$$d(I, J; F) = K/2 \quad (2.4a)$$

$$q(I, J; F) = \frac{\frac{3}{4}K(K+1) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} \quad (2.4b)$$

mit $K = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$

ferner $A = \mu_I \overline{H(0)}/IJhc$ (2.4c)
(magnetische Dipolwechselwirkungskonstante)

$B = eQ_I \overline{\Phi_{JJ}(0)}/hc$ (2.4d)
(elektr. Quadrupolwechselwirkungskonstante)

^{*)} Multipolwechselwirkungen höherer Ordnung, wie die magnetische Oktupolwechselwirkung, brauchen hier nicht in Betracht gezogen zu werden, da sie sich wegen der Kleinheit des Effekts (vgl. [FM 61]) der Bestimmung durch interferenzspektroskopische Methoden entziehen.

μ_I	: magnetisches Kerndipolmoment
$\overline{H(0)}$	: mittleres, von der Elektronenhülle am Kernort erzeugtes Magnetfeld
e	: Elementarladung
Q_I	: elektrisches Kernquadrupolmoment (spektroskopisches Quadrupolmoment)
$\overline{\Psi_{JJ}(0)}$	: mittlerer Vektorgradient des elektrischen Feldes der Elektronenhülle am Kernort

Aus der beobachteten Hfs-Aufspaltung einer Spektrallinie kann man bei Kenntnis des Kernspins und der Quantenzahlen J der beiden an dem Übergang beteiligten Elektronenterme nach Gl. (2.4) die Aufspaltungsfaktoren (Wechselwirkungskonstanten) A und B der Terme bestimmen.

Um die spätere Auswertung der ISV-Messungen zu erleichtern, wurden in Vorversuchen [Sch 70, FHK 71] die Aufspaltungsfaktoren der Xenon I-Terme $6s'[1/2]_1$, $6p[1/2]_1$, $6p[3/2]_2$ und $6p'[3/2]_1$ unter Verwendung von hoch angereicherten Proben der Isotope ^{129}Xe und ^{131}Xe (siehe Abschnitt 3.2) gemessen. Für den Term $6s[3/2]_2$ wurden die mit hoher Genauigkeit von Faust und McDermott [FM 61] bestimmten Aufspaltungsfaktoren übernommen. In Tabelle 2 sind die für die untersuchten Übergänge interessierenden Hfs-Aufspaltungsfaktoren zusammengestellt. Die von uns gemessenen Aufspaltungsfaktoren sind den Werten anderer Autoren gegenübergestellt; außerdem werden sie mit theoretischen Werten verglichen, die von Liberman [Lib 69, Lib 71] unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen und von Konfigurationswechselwirkung berechnet wurden. Die experimentellen Aufspaltungsfaktoren der verschiedenen Autoren stimmen innerhalb der angegebenen Fehlergrenzen in befriedigender Weise überein und können auch durch die Rechnungen von Liberman theoretisch erklärt werden.

T a b e l l e 2

Gemessene und berechnete Hfs-Aufspaltungsfaktoren A und B für einige $5p^5 6s$ - und $5p^5 6p$ -Terme des Xenon I-Spektrums

Term	$A(^{129}\text{Xe})$ mK	$A(^{131}\text{Xe})$ mK	$B(^{131}\text{Xe})$ mK	Zitat
$6s [3/2]_2$	-79,5393	23,5654	8,423	exp. a)
	-79,55(5)	-	-	exp. b)
	-79,8	-	8,38	ber. d),e)
$6s' [1/2]_1$	-193,3(3)	57,2(1)	0,8(2)	diese Arbeit
	-193,70(10)	57,05(20)	1,1(1)	exp. b)
	-194,3	-	1,24	ber. d),e)
$6p [1/2]_1$	-46,9(2)	14,0(1)	1,0(1)	diese Arbeit
	-46,89(15)	-	-	exp. b)
	-46,6	13,99	1,04(16)	exp. c),e)
	-46,4	-	1,1	ber. d),e)
$6p [3/2]_2$	-29,6(1)	-	-	diese Arbeit
	-29,77(10)	-	-	exp. b)
	-30	8,83	1,0	exp. c),e)
	-29,6	-	0,9	ber. d),e)
$6p' [3/2]_1$	-147,8(3)	43,8(3)	0,5(3)	diese Arbeit
	-147,67(10)	44,07(20)	0,54(10)	exp. b)
	-150,4	-	0,8	ber. d),e)

exp. = experimentelle Werte; ber. = berechnete Werte

a) [FM 61] b) [JC 72] c) [Lib 68]
d) [Lib 69] e) [Lib 71]

Vergleicht man das Verhältnis $A(^{129}\text{Xe})/A(^{131}\text{Xe})$ der experimentellen Aufspaltungsfaktoren mit dem Verhältnis der Kern-g-Faktoren

$$g_I(^{129}\text{Xe})/g_I(^{131}\text{Xe}) = -3,37341(10) \quad \text{nach [Bri 68],}$$

wobei $g_I = \mu_I/I$ ist, so stimmen beide Verhältnisse für die Terme $6s'[1/2]_1$, $6p[1/2]_1$ und $6p'[3/2]_1$ innerhalb der Fehlergrenzen überein; eine Hfs-Anomalie läßt sich also für diese Terme bei der erreichten Meßgenauigkeit nicht feststellen. Aus den präziseren Messungen mit Hilfe der Atomstrahl-Radiofrequenzmethode [FM 61] bestimmt man jedoch für den Term $6s[3/2]_2$ eine Hfs-Anomalie von

$$^{129}\Delta^{131} = \frac{A(^{129}\text{Xe}) \cdot g_I(^{131}\text{Xe})}{A(^{131}\text{Xe}) \cdot g_I(^{129}\text{Xe})} - 1 = 0,054(1)\% .$$

3. EXPERIMENTELLES

3.1 Meßmethode

Bevor Einzelheiten der Meßanordnung und der Messungen beschrieben werden, sei zunächst das Prinzip des Meßverfahrens erläutert. Ziel der Untersuchungen ist es, die ISV in den Emissionslinien des Xenon I-Spektrums mit den Mitteln der Interferenzspektroskopie zu bestimmen. Als Lichtquelle dient in unserem Fall eine Hohlkathoden-Entladung, die in Xenon und einem zusätzlichen Trägergas brennt. Die Auflösung und Registrierung der Hfs der interessierenden Spektrallinien erfolgt mit Hilfe eines photoelektrisch registrierenden Fabry-Pérot-Interferometers (FPI).

Eine vollständige Auflösung der Hfs der Xenon-Linien kann jedoch bei Verwendung von Xenon in der natürlichen Isotopenzusammensetzung nicht erreicht werden. Der Grund hierfür besteht darin, daß 7 der stabilen Xenon-Isotope wegen ihres Kernspins $I=0$ keine Hfs-Aufspaltung liefern und daß somit die zu diesen Isotopen gehörigen Hfs-Komponenten bei einer ISV je hinzukommendes Neutron von $\Delta\nu_{\text{ISV}}/\Delta N < 2 \text{ mK}$ (vgl. z.B. [JC 70a]) und einer typischen Linienbreite von $\Delta\nu = 15 \text{ mK} \dots 50 \text{ mK}$ nicht getrennt werden können. Für die Messung der ISV scheint also, insbesondere im Hinblick auf die Untersuchung der nur mit 0,096% bzw. 0,09% im natürlichen Isotopengemisch vorkommenden Isotope ^{124}Xe und ^{126}Xe , die Verwendung getrennter Isotope unumgänglich zu sein.

Andererseits birgt aber die Anregung hoch angereicherter Isotope in getrennten Entladungslampen die Gefahr einer Verfälschung der ISV-Messungen auf Grund von unterschiedlichen Entladungsbedingungen in den einzelnen Lichtquellen [FH 69]. Es empfiehlt sich daher, jeweils die beiden Isotope, zwischen denen die ISV gemessen werden soll, gleichzeitig in derselben Entladungslampe anzuregen. Das wiederum ist nur dann sinnvoll, wenn man Isotopen-Gemische aus jeweils einem geraden und einem ungeraden hoch angereicherten Xenon-Isotop verwendet, da dann bei hinreichend großer Hfs-Aufspaltung des ungeraden Isotops keine Überlappung der Hfs-Komponenten zu befürchten ist.

Es wurden daher für die ISV-Messungen Spektrallinien mit möglichst großer Hfs-Aufspaltung ausgewählt (vgl. Abschnitt 2.2) und die ISV der geraden Isotope jeweils in Bezug auf eines der beiden ungeraden Isotope ^{129}Xe oder ^{131}Xe gemessen.

Über die Isotopenanreicherung und die Herstellung der Isotopen-Gemische wird in den nächsten Abschnitten eingehender berichtet.

3.2 Elektromagnetische Isotopentrennung

Die Trennung der Xenon-Isotope wurde von G. Krömer am elektromagnetischen Isotopenseparator MARS 1 in Marburg durchgeführt. Dazu seien kurz einige charakteristische Daten genannt (eine ausführliche Beschreibung des Marburger Isotopenseparators findet man in [KDS 58]):

Xenon im natürlichen Isotopengemisch wird in einer Penning-Ionenquelle ionisiert; die Ionen treten aus der Quelle aus, werden durch eine Spannung von 20 kV beschleunigt und mit Hilfe einer elektrostatischen Einzellinse fokussiert. Die magnetische Ablenkung des Ionenbündels erfolgt in einem 90° -Sektor-Magneten; der Ionenbahnradius im Magnetfeld beträgt dabei etwa 1 m. Durch eine Spaltblende von ca. 2 mm Breite gelangen die Ionen des anzureichernden Isotops schließlich auf einen Auffänger.

Als Auffänger für Edelgase kann, wie schon früher von Bohr, Koch und Rasmussen [BKR 52] beschrieben, eine Metallfolie dienen. Die Ionen dringen bei genügend großer Beschleunigungsspannung bis zu einigen hundert Å tief in die Folie ein [Jok 69] und werden im Metallgitter zurückgehalten. Erst bei Erwärmung der Folie kann das aufgesammelte Edelgas wieder freigesetzt werden. Man erreicht je nach Ionen-Energie und Auffängermaterial im Falle der Sättigung des Auffängers Flächendichten von einigen μg des Edelgases je cm^2 der Auffängerfolie [AB 61]. Um die thermische Belastung der Auffängerfolie herabzusetzen und die Folie möglichst gleichmäßig mit Edelgasionen zu beschießen, muß der Auffänger im Ionenstrahl bewegt werden. Sofern die Ionenstromstärke genügend groß ist, kann man zu diesem Zweck als Folienträger ein Karussell nach Lerner [Ler 65] benutzen, das durch den Impuls der auftreffenden Ionen in Rotation versetzt wird. Dieses Verfahren wurde bei der Trennung der häufigeren Xenon-Isotope (relative natürliche Häufigkeit $\gtrsim 10\%$) angewandt [FHK 70]. Bei der Trennung der selteneren Isotope mußte dagegen wegen des geringeren Ionenstroms der Folienträger durch einen externen Motor bewegt werden.

Für die Herstellung der Isotopengemische, wie sie für die ISV-Messungen erwünscht sind (Abschnitt 3.1), gibt es zwei Möglichkeiten. Zum einen können die Isotopenproben zunächst möglichst hoch angereichert auf verschiedenen Auffängern hergestellt und später für die optischen Untersuchungen im gewünschten Verhältnis mit anderen angereicherten Isotopenproben gemischt werden, oder aber die Isotopengemische können jeweils direkt auf einem Auffänger hergestellt werden, indem man dieselbe Folie nacheinander mit zwei verschiedenen Isotopen beschießt. Bei den Xenon-Trennungen wurde sowohl das eine als auch das andere Verfahren angewandt; in den meisten Fällen ist jedoch der erste Weg vorzuziehen, da er die Möglichkeit bietet, vor der Herstellung der Mischung und der anschließenden ISV-Messung die erzielte Anreicherung und gegebenenfalls die Hfs-Aufspaltung der getrennten Isotope zu bestimmen.

Nach der oben beschriebenen Methode wurden angereicherte Proben aller stabilen Xenon-Isotope sowie Gemische der Isotope ^{128}Xe und ^{129}Xe bzw. ^{131}Xe und ^{132}Xe hergestellt. Als Auffänger diente jeweils eine zuvor gründlich gereinigte und entgaste Kupferfolie von 0,02 mm Dicke (vgl. auch [Sch 70]).

Während bei den vorbereitenden Messungen [Sch 70] für die Füllung der Entladungslampen und Anregung des Xenon-Spektrums noch jeweils ca. 30 μg Xenon benötigt wurden, konnte durch Verkleinerung des Entladungsgefäßes und veränderte Anregungsbedingungen die für eine Füllung erforderliche Menge auf 0,5 μg ... 1 μg *) reduziert werden. Erst dadurch wurde auch die Anreicherung der für die optischen Untersuchungen nötigen Mengen der seltenen Xenon-Isotope innerhalb realisierbarer Trennzeiten ermöglicht (für 1 μg ^{124}Xe betrug die Trennzeit etwa 10 Stunden).

Über die Weiterverarbeitung der mit den getrennten Isotopen beladenen Auffängerfolien ("Gas-Targets") wird in Abschnitt 3.3 berichtet.

*) Die Angaben über die im Auffänger gesammelte Gas-Menge wurden durch zeitliche Integration des Ionenstromes während der Trennung gewonnen. Die genannten Werte sind daher nur als obere Grenze für die verwendeten Substanzmengen zu verstehen.

T a b e l l e 3

Relative Häufigkeiten der Xenon-Isotope in einigen der benutzten angereicherten Isotopenproben und im natürlichen Gemisch

Isotopen- probe	relative Häufigkeit H / 10 ⁻²								
	¹²⁴ Xe	¹²⁶ Xe	¹²⁸ Xe	¹²⁹ Xe	¹³⁰ Xe	¹³¹ Xe	¹³² Xe	¹³⁴ Xe	¹³⁶ Xe
124	(<u>93,4</u>)	(0,1)	(0,6)	3,7	(0,4)	0,9	(0,8)	(0,1)	-
126	(0,1)	(<u>90,5</u>)	(2,0)	4,9	(0,5)	1,1	(0,8)	(0,1)	-
129	-	-	(0,2)	<u>99,0</u>	(0,5)	0,3	-	-	-
130	-	-	-	9,4	(<u>84,2</u>)	5,8	(0,6)	-	-
131	-	-	-	0,9	(0,5)	<u>95,6</u>	(3,0)	-	-
natürl. Gemisch	0,096	0,090	1,919	26,44	4,08	21,18	26,89	10,44	8,87

Für jede Probe konnte aus der Hfs-Untersuchung jeweils nur die Summe der eingeklammerten Häufigkeiten bestimmt werden. Die Verteilung auf die einzelnen geraden Isotope wurde an Hand des Massenspektrums und der natürlichen Häufigkeiten abgeschätzt.

Die Isotopenzusammensetzung der angereicherten Proben und der Isotopengemische kann aus den relativen Intensitäten der Hfs-Komponenten der untersuchten Xenon-Übergänge abgeschätzt werden. Dazu ist allerdings zu bemerken, daß wegen der weitgehenden Überlappung der Komponenten der geraden Xenon-Isotope aus den optischen Untersuchungen allein nur die relativen Häufigkeiten der ungeraden Isotope im Verhältnis zur Summe aller in der Probe vorhandenen geraden Isotope bestimmt werden können. Zieht man zusätzlich noch das während der Isotopentrennung aufgenommene Massenspektrum sowie die natürlichen Häufigkeiten der Xenon-Isotope (vgl. Tabelle 1) zur Auswertung heran, so lassen sich auch für die einzelnen geraden Isotope die relativen Häufigkeiten in der untersuchten Probe angeben.

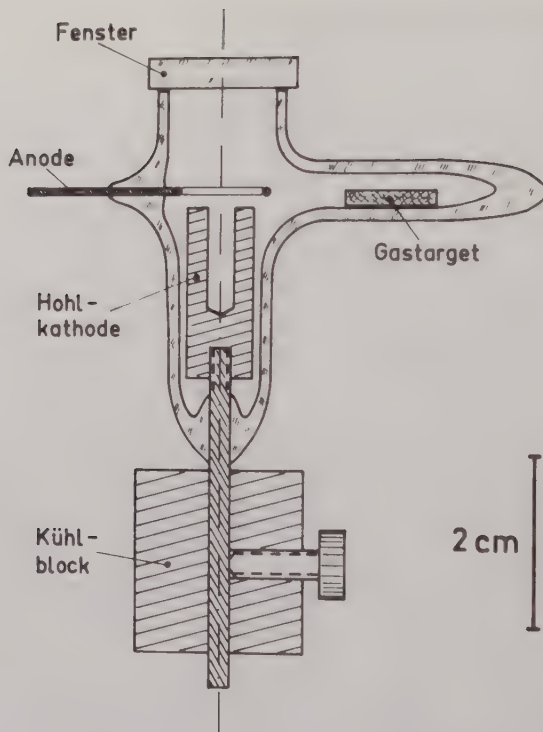
In Tabelle 3 sind die so ermittelten relativen Häufigkeiten der Xenon-Isotope in einigen der benutzten Proben und, im Vergleich dazu, die natürlichen Häufigkeiten zusammengestellt.

3.3 Anregung der Spektrallinien

3.3.1 Beschreibung der Lichtquelle

Die Übergänge des Xenon I-Spektrums können in einer gewöhnlichen Hohlkathoden(HK)-Entladung unter Verwendung von Helium als Trägergas angeregt werden [Sch 70]. Bei der Konstruktion der HK-Entladungslampe muß allerdings den besonderen Verhältnissen Rechnung getragen werden, die bei der Verwendung kleinster Mengen eines Edelgases (bis hinunter zu ca. $5 \cdot 10^{-9}$ mol bei der Untersuchung der seltenen Xenon-Isotope) gegeben sind. So kann das Trägergas nicht, wie bei der Anregung fester Substanzen üblich, während des Betriebes der Entladungslampe durch Zirkulation über eine Kohlefaller gereinigt werden. Die Anregung kann vielmehr nur in einem abgeschlossenen Gefäß erfolgen. Damit entfällt auch die Möglichkeit, den Trägergas-Druck im Entladungsgefäß während des Betriebes zu variieren. Ferner muß das Volumen des Entladungsgefäßes möglichst klein gehalten werden, damit auch bei den geringen zur Verfügung stehenden Substanzmengen der Xenon-Partialdruck in der Lampe nicht zu klein wird und eine Anregung des Xenon-Spektrums in der HK gewährleistet ist.

Figur 2 zeigt in einem Schnitt den Aufbau der verwendeten Entladungslampen. Die eigentliche Hohlkathode besteht aus Reinstkupfer und besitzt eine Bohrung von 3 mm Durchmesser und 12 mm Tiefe. Sie ist auf einen in den Glaskörper der Entladungslampe eingeschmolzenen Stift aus Vacon 10 aufgeschraubt und kann bei Bedarf leicht ausgewechselt werden. An den Kathoden-Stift kann von außen ein Kühlblock aus Kupfer angeschraubt werden. Als Anode dient ein Ring aus Vacon-Draht, der ebenfalls in die Glaswand eingeschmolzen ist. Die Entladungslampe wird durch ein Fenster aus Ultrasil-Glas abgeschlossen. Das Fenster ist mit einem Schmelzkitt (Picein) auf den Lampenkörper aufgekitet und kann zum Auswechseln der Hohlkathode oder zum Reinigen der Lampe entfernt werden. In einem zugeschmolzenen Seitenarm des Entladungsgefäßes befindet sich die mit den getrennten Xenon-Isotopen beladene Metallfolie, hier kurz als "Gas-Target" bezeichnet.



Figur 2: Schnitt durch die Hohlkathoden-Entladungslampe

3.3.2 Füllung der Entladungslampe

Damit die bei der elektromagnetischen Isotopentrennung in die Auffängerfolien eingeschossenen Xenon-Isotope in der HK-Entladungslampe angeregt werden können, hat man das Xenon-Gas aus den Gas-Targets zu befreien, indem man diese ausheizt. Das geschieht sinnvollerweise direkt im Entladungsgefäß, um Verluste beim Umfüllen des Gases zu vermeiden. Beim Füllen der Entladungslampe gehen wir daher wie folgt vor:
Von den Gas-Targets werden entsprechend der benötigten Menge

(und gewünschten Mischung) Stücke abgetrennt und in den seitlichen Arm des Entladungsgefäßes eingebracht.

Über den Seitenarm wird das Entladungsgefäß an eine Vakuumapparatur angeschlossen und auf Hochvakuum ausgepumpt. Nach Ausheizen der Gefäßwände wird die Entladungslampe mit 4...5 Torr Reinst-Helium als Trägergas gefüllt und der Seitenarm zugeschmolzen. Das angereicherte Xenon kann nun im abgeschlossenen Entladungsgefäß dem Trägergas zugemischt werden, indem man das Gas-Target durch induktive Erwärmung einige Minuten lang bei ca. 1000°C ausglüht.

3.3.3 Anregungsbedingungen

Eine Hohlkathoden-Entladung kann bei den zur Verfügung stehenden Substanzmengen von Xenon ($1\text{ }\mu\text{g}$ Xenon entspricht bei dem gegebenen Gefäßvolumen und einer Temperatur von 0°C einem Partialdruck von ca. $2 \cdot 10^{-2}$ Torr) nur in einem Trägergas gezündet werden. Wegen seines linienarmen Spektrums wurde Helium als Trägergas verwendet. Ein Heliumdruck von $p_{\text{He}} = 4...5$ Torr erwies sich für ein zuverlässiges Brennen der Entladung als ausreichend. Bei diesen verhältnismäßig niedrigen Gasdrücken ist die Linienbreite einer Spektrallinie (abgesehen von der Apparatebreite) im wesentlichen nur durch die Dopplerverbreiterung bestimmt. Da die Dopplerbreite proportional zur Wurzel aus der absoluten Temperatur des leuchtenden Gases ist [Kop 56], kann die Linienbreite durch Kühlung der Entladung herabgesetzt werden. Während des Betriebs der Entladungslampe wurde daher der an der Kathode angebrachte Kühlblock und der untere Teil des Entladungsgefäßes in flüssigem Stickstoff gekühlt. Um den Einfluß der Selbstumkehr in den Xenon-Übergängen $\lambda=8206\text{\AA}$, $8231\text{\AA}$ und $9799\text{\AA}$ (vgl. Abschnitt 2.2) gering zu halten, wurde die HK-Entladungslampe bei möglichst kleinen Entladungsstromstärken betrieben. Typische Werte für die HK-Spannung U_{HK} und die HK-Entladungsstromstärke I_{HK} waren:

$$U_{\text{HK}} = 200\text{ V} \quad \text{und} \quad I_{\text{HK}} = 3\text{ mA} .$$

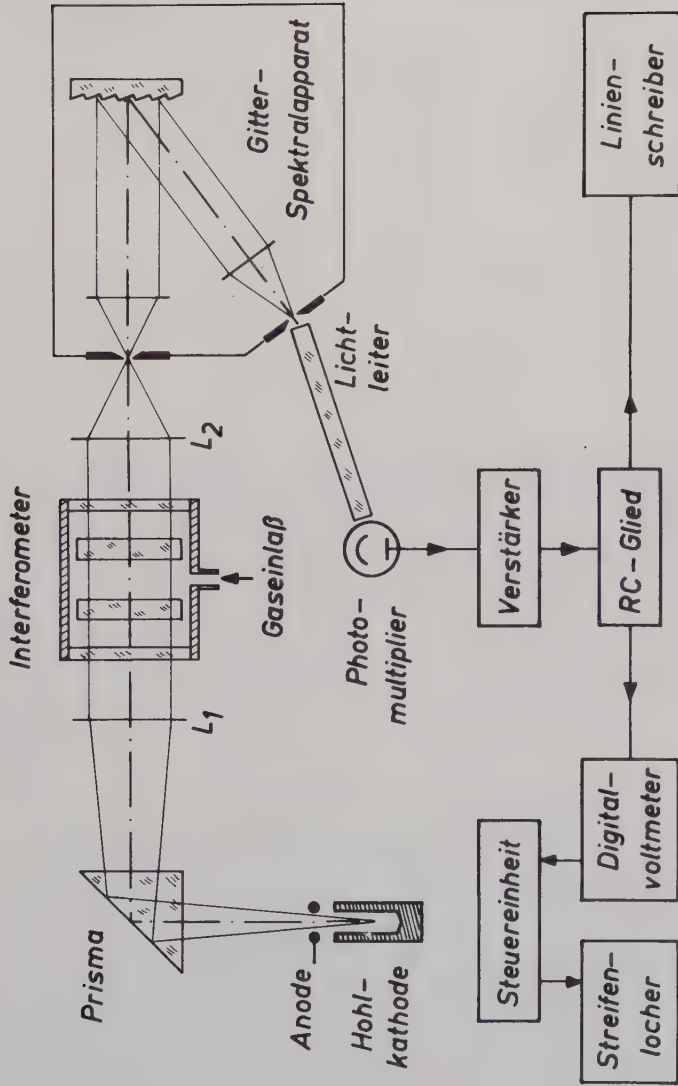
3.4 Registrierung der Hyperfeinstruktur

Die Auflösung und Registrierung der Hfs der Xenon-Übergänge erfolgte unter Verwendung eines photoelektrisch registrierenden Fabry-Pérot-Interferometers(FPI) mit digitaler Datenausgabe, dessen Aufbau in der von uns benutzten Anordnung ausführlich von Hühnemann [Hüh 63, Hüh 67b] beschrieben wurde. Als Vorzerleger diente ein Universal-Spektrograph GH der Firma Steinheil mit Gitterausrüstung (Reflexionsgitter von Bausch & Lomb mit einer Strichzahldichte von 1200 mm^{-1} und einer Blaze-Wellenlänge von $\lambda_{\text{Bl}}=10000\text{\AA}$). Die Verspiegelung der Interferometerplatten bestand aus dielektrischen Vielfachschichten.

Den prinzipiellen Versuchsaufbau zeigt Figur 3.

In einer Hohlkathoden-Entladung wird das Xenon-Spektrum angeregt, vgl. Abschnitt 3.3. Ein Umlenkprisma und eine Sammellinse (L_1) sorgen für die Ausleuchtung des Interferometers durch ein Parallellichtbündel. Das vom Interferometer erzeugte Interferenz-Ringsystem wird mit Hilfe der Linse L_2 auf eine Lochblende abgebildet, die sich in der Ebene des Eintrittspaltes des Spektralapparates befindet. Der Spektralapparat nimmt die Grobzerlegung des Spektrums vor. Danach gelangt das Licht durch den Austrittsspalt des Spektralapparates über einen Ultrasil-Lichtleiter auf den Photodetektor. Als Detektor dient ein infrarotempfindlicher Photomultiplier vom Typ Valvo 150 CVP und, für einen Teil der Messungen, ein rotempfindlicher Photomultiplier des Typs RCA, C 7164 R. Während der Valvo-Multiplier zur Herabsetzung des Dunkelstromes mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden muß, genügt für den RCA-Multiplier eine Kühlung mit Hilfe einer Peltier-Zelle (Temperatur $T \approx -20^\circ\text{C}$).

Zur Registrierung der Linienstruktur wird nach der Methode von Jacquinet [JD 48] der Gasdruck im Interferometer-Gehäuse zeitlinear geändert, indem man in das vorher evakuierte Gehäuse gleichmäßig und langsam ein Gas einströmen läßt. Damit ist eine stetige Vergrößerung des optischen Weges zwischen den FPI-Platten verbunden, was dazu führt, daß aus dem Zentrum des



Figur 3: Versuchsaufbau für die photoelektrische Hyperfeinstruktur-Registrierung (schematisch)

Interferenzsystems kontinuierlich neue Ringe herausquellen. Da die Anzahl der je Druckintervall hervorquellenden Interferenzordnungen proportional zur Änderung des Brechungsindex n zwischen den FPI-Platten ist, wurden als Registriergase neben Stickstoff ($n=1,00030^*$) auch Gase mit einem höheren Brechungsindex, nämlich CO_2 ($n=1,00045^*$) und Frigen 12 (CCl_2F_2 ; $n=1,00116^*$) benutzt, mit denen 1,5mal bzw. etwa 4mal so viele Ordnungen registriert werden können wie mit Stickstoff [MSW 71].

Der entsprechend der registrierten Hfs variierende Photostrom des Photomultipliers wird durch einen Gleichstromverstärker (Keithley Model 417 Picoammeter) verstärkt und zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses durch ein RC-Glied (Zeitkonstante $\tau = 0,5$ s oder 1 s) geglättet. Das Signal wird dann einerseits durch einen Linienschreiber (Hartmann & Braun Linecomp) aufgezeichnet, andererseits in äquidistanten zeitlichen Schritten, die durch die Zeitkonstante des RC-Gliedes bestimmt sind, mit einem Digitalvoltmeter (Solartron LM 1420.2) gemessen und der Meßwert auf Lochstreifen ausgegeben.

*) Die Angabe des Brechungsindex bezieht sich auf eine Temperatur von 0°C und einen Druck von 760 Torr sowie auf die Verwendung von Natrium-D-Licht.

4. AUSWERTUNG DER MESSUNGEN UND MESSERGEBNISSE

4.1 Auswerteverfahren

Die Auswertung der in digitaler Form auf Lochstreifen vorliegenden Hfs-Registrierungen erfolgte an einer elektronischen Rechenanlage (CII C 90-40) nach einem von Hühnermann [Hüh 67a,b] entwickelten Auswerteverfahren. Danach werden zunächst die 8 ... 20 je Einzelmessung registrierten Interferenzordnungen zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses zu einer Ordnung überlagert. Mit Hilfe des bekannten Spiegelabstandes d des Interferometers kann das Dispersionsgebiet $\Delta\nu_{DG}$ über die Beziehung

$$\Delta\nu_{DG} = \frac{1}{2d} \quad (4.1)$$

kalibriert werden. Der Elektronenrechner errechnet dann aus mehreren die Linienstruktur bestimmenden Parametern eine theoretische Hfs-Kurve und paßt diese nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an die überlagerte Meßkurve an. Das Ergebnis dieser Variationsrechnung ist ein Satz optimal angepaßter Parameter, darunter die interessierenden Meßgrößen, nämlich Isotopieverschiebungen bzw. Hfs-Aufspaltungsfaktoren. Im einzelnen ist die Linienstruktur durch folgende Größen bestimmt:

1) Relative Lage der Hfs-Komponenten.

Innerhalb einer Hfs-Ordnung ergibt sich die relative Schwerpunktslage der einzelnen Komponenten aus einer Verschiebung der Linienschwerpunkte ν_S der Isotope gegeneinander, also der Isotopieverschiebung $\Delta\nu_{ISV}^{(1,2)} = \nu_S(1) - \nu_S(2)$ zwischen je zwei Isotopen (1) und (2), sowie für die ungeraden Isotope aus einer zusätzlichen Verschiebung $\Delta\nu_{Hfs}$ der Hfs-Komponenten auf Grund der Hfs-Aufspaltung der an dem Übergang beteiligten Terme; für einen Übergang zwischen den Hfs-Termen F_o und F_u zweier Multipletts ist die Verschiebung gegenüber dem Linienschwerpunkt nach Gl. (2.4) bestimmt durch $\Delta\nu_{Hfs}(F_o, F_u) = \frac{1}{hc} \cdot \{ \Delta E_{Hfs}(F_o) - \Delta E_{Hfs}(F_u) \}$

und hängt demnach bei Kenntnis der Quantenzahlen I, J und F nur noch von den A- und B-Faktoren der beteiligten Feinstrukturterme ab.

2) Relative Intensität der Hfs-Komponenten.

Sie ist bestimmt durch die relativen Häufigkeiten der einzelnen Isotope in dem untersuchten Isotopengemisch und durch die relativen Übergangswahrscheinlichkeiten für Dipolübergänge (siehe z.B. [Kop 56]).

3) Linienprofil.

Das allen Komponenten einer Hfs-Ordnung gemeinsame Linienprofil - die Faltung einer Gauß-Kurve mit der Airy-Verteilung - läßt sich durch zwei Parameter beschreiben.

4) Selbstumkehr.

Der Einfluß von Selbstumkehreffekten, die sich trotz des kleinen Xenon-Gasdruckes und der geringen Entladungsstromstärken (vgl. Abschnitt 3.3.3) bei den Übergängen $\lambda=8231\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$ und in geringerem Maße auch bei einigen Messungen der Linie $\lambda=8206\text{\AA}$ bemerkbar machten, wurde durch einen weiteren Parameter, den Selbstumkehr-Grad α , berücksichtigt. Eine Korrektur der relativen Intensitäten der Hfs-Komponenten gemäß dem Ansatz

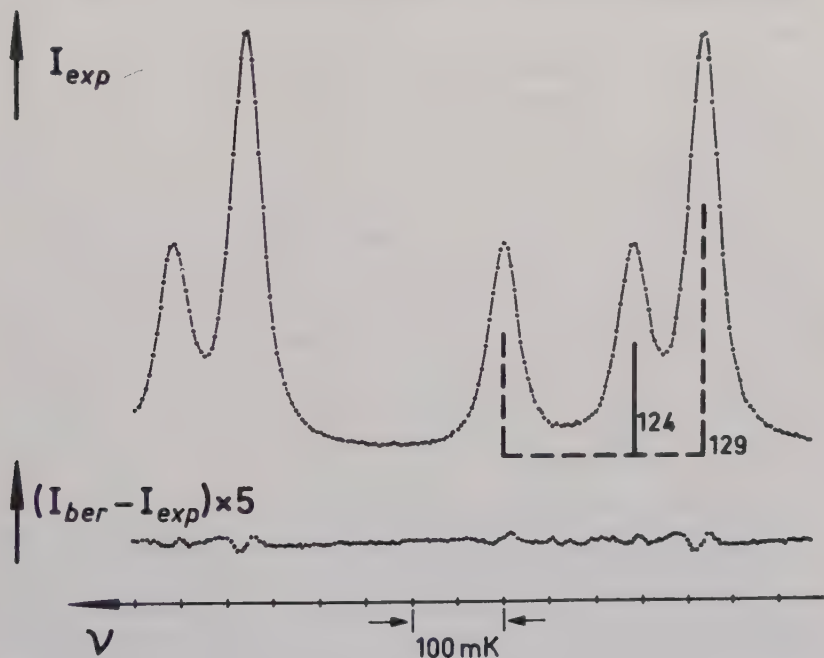
$$i_{\text{exp}} = i_{\text{th}} - \alpha \cdot i_{\text{th}}^2 \quad (4.2)$$

(i_{exp} : gemessene relative Intensität einer Komponente,
 i_{th} : theoretische relative Intensität der Komponente)

erwies sich bei der Auswertung der betreffenden Messungen als ausreichend; insbesondere war es nicht nötig, für die einzelnen Komponenten ein eigenes Linienprofil zu bestimmen. Aus den verschiedenen Anpassungen wurden für das Absorptionsglied $\alpha \cdot i_{\text{th}}^2$ Werte zwischen 0 und $0,3 \cdot i_{\text{th}}$ ermittelt.

Insgesamt sind zur vollständigen Beschreibung der gemessenen Hfs-Kurven bis zu 36 Parameter nötig, wobei bei den Anpassungen allerdings nur einige wenige als freie Parameter variiert werden. Bei der Auswertung der ISV-Messungen reduziert sich die Zahl der freien Parameter auf 5 bis 7, nämlich die Kurvenformparameter, die Isotopen-Mischungsverhältnisse, die gesuchte ISV und gegebenenfalls den Selbstumkehr-Parameter. Alle übrigen Parameter, insbesondere die Hfs-Aufspaltungsfaktoren (Tabelle 2), werden entsprechend den Ergebnissen der Vorversuche fest vorgegeben.

Ein typisches Beispiel einer Anpassung zeigt Figur 4.



Figur 4: Beispiel für eine Anpassung.

Hyperfeinstruktur der Linie $\lambda=8206\text{\AA}$ für ein Isotopengemisch aus ^{124}Xe (—) und ^{129}Xe (- - -)

Im oberen Teil der Figur ist eine überlagerte Hfs-Meßkurve I_{exp} (in diesem Fall der Linie $\lambda = 8206\text{\AA}$ für das Isotopengemisch $^{124},^{129}\text{Xe}$) wiedergegeben. Die Lagen und relativen Intensitäten der Hfs-Komponenten sind eingezeichnet; dabei wurden Beimischungen von Isotopen mit einer relativen Häufigkeit von weniger als 1% nicht berücksichtigt.

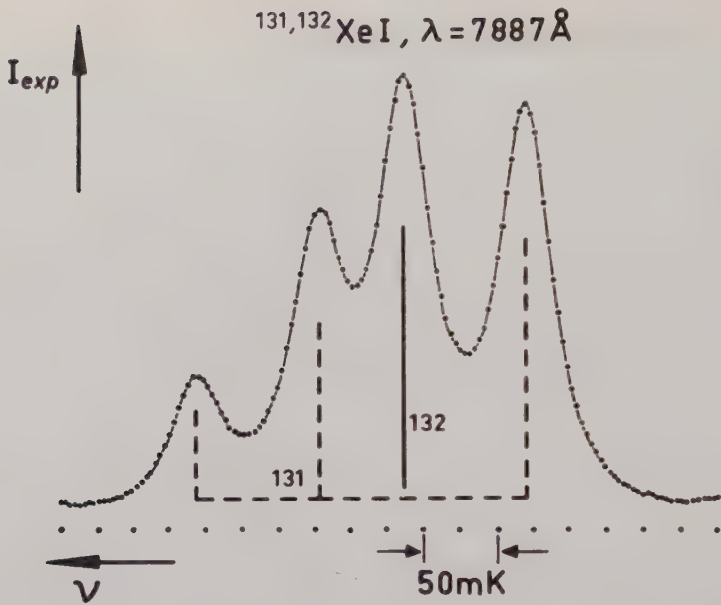
Die an die Meßkurve angepaßte berechnete Hfs-Kurve I_{ber} ist nicht eingezeichnet, da sie von I_{exp} mit dem Auge kaum zu unterscheiden ist. Statt dessen ist unterhalb der experimentellen Kurve die Differenz $I_{\text{ber}} - I_{\text{exp}}$ aufgetragen. Diese Differenz ist ein Maß für die Güte der Anpassung und macht evtl. vorliegende systematische Fehler der Anpassung sichtbar. Die mittlere Abweichung der angepaßten Kurve von der experimentellen Kurve lag in den untersuchten Fällen typisch bei 0,25% des Maximalwertes von I_{exp} .

4.2 Auswertung der einzelnen Meßserien

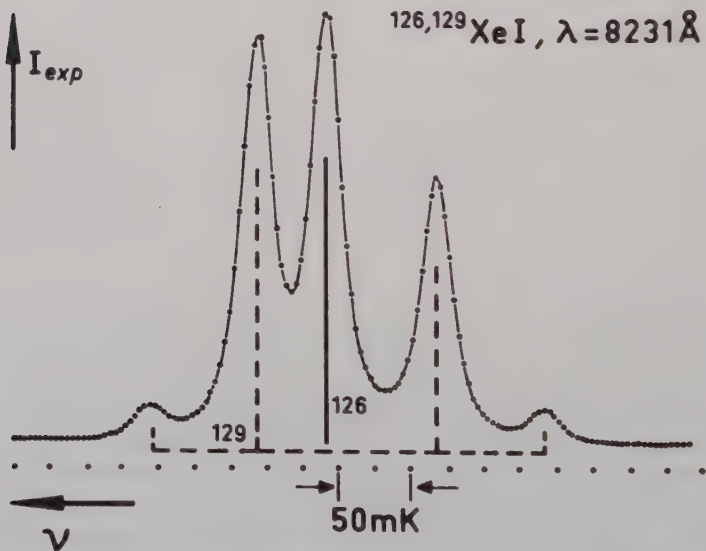
Die ISV-Messungen wurden an 8 Gemischen aus jeweils zwei angereicherten Proben der geraden und ungeraden Xenon-Isotope durchgeführt. Mit jedem dieser Gemische wurde die Hfs der Xenon I-Linien $\lambda=7887\text{\AA}$, $8206\text{\AA}$ und $9799\text{\AA}$ registriert, mit den Isotopengemischen $^{124,129}\text{Xe}$, $^{126,129}\text{Xe}$, $^{131,132}\text{Xe}$ und $^{129,134}\text{Xe}$ zusätzlich die Hfs der Linie $\lambda=8231\text{\AA}$. Insgesamt waren somit 28 verschiedene Meßserien, jede bestehend aus 3...6 Einzelmessungen mit unterschiedlichen Spiegelabständen des Interferometers, unterschiedlichen Anregungsbedingungen oder Isotopenbeimischungen, auszuwerten.

Zuvor waren in Vorversuchen mit hoch angereichertem ^{129}Xe und ^{131}Xe die Hfs-Aufspaltungsfaktoren der Terme $6s'[1/2]_1$, $6p[1/2]_1$, $6p[3/2]_2$ und $6p'[3/2]_1$ (siehe Tabelle 2) sowie die Isotopenzusammensetzung der benutzten Proben (Tabelle 3) bestimmt worden. Diese Parameter konnten zusammen mit den von [FM 61] für den Term $6s[3/2]_2$ bestimmten Aufspaltungsfaktoren und den von [Lib 71] gemessenen Werten $A(^{131}\text{Xe})$ und $B(^{131}\text{Xe})$ für den Term $6p[3/2]_2$ bei der Auswertung der ISV-Messungen fest vorgegeben werden. Somit waren bei den Anpassungen neben den Kurvenformparametern nur die ISV und das Mischungsverhältnis der beiden Isotopenproben als freie Parameter zu variieren. Bei mehreren Messungen der Linien $\lambda=8231\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$ war allerdings noch ein weiterer Parameter nötig, der den Einfluß der Selbstumkehr in diesen Linien berücksichtigt (vgl. Abschnitt 4.1).

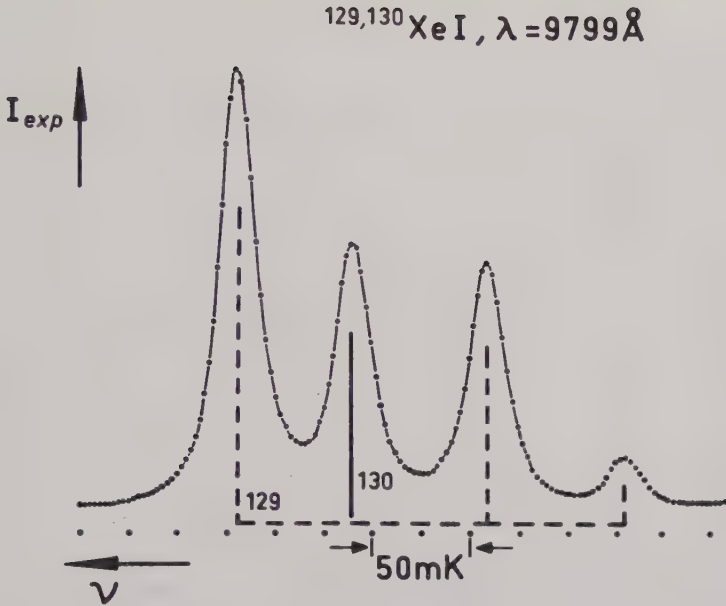
Die Figuren 5 bis 7 zeigen jeweils eine typische Hfs-Registrierung der Linien Xe I, $\lambda=7887\text{\AA}$, $8231\text{\AA}$ und $9799\text{\AA}$ (ein Beispiel für eine Hfs-Kurve des Übergangs $\lambda=8206\text{\AA}$ wurde bereits in Figur 4 gezeigt). In diesen Diagrammen sind die überlagerten Meßkurven (Photostrom I_{exp} in Abhängigkeit von der Wellenzahl ν) dargestellt; die Lagen und relativen Intensitäten der einzelnen Hfs-Komponenten sind in die Meßkurven eingezeichnet; dabei blieben Isotope mit einer relativen Häufigkeit von weniger als 2% unberücksichtigt.



Figur 5: Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda = 7887 \text{ \AA}$



Figur 6: Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda = 8231 \text{ \AA}$



Figur 7: Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$

Die Auswertungsergebnisse für die ISV aller vier untersuchten Spektrallinien sind in Tabelle 4 zusammengestellt. Bei den angegebenen Werten handelt es sich jeweils um den gewogenen Mittelwert der Einzelmessungen einer Meßserie. Als Fehler des Mittelwertes wird die dreifache Standardabweichung angegeben; die Fehlergrenzen wurden so gewählt, daß sie die Ergebnisse der Einzelmessungen umschließen.

T a b e l l e 4.

Gemessene Isotopieverschiebung in den vier untersuchten Xenon I-Linien
und ausgeglichene ISV-Werte für die Linie $\lambda=9799\text{\AA}$

Isotopen- paar A, A'	Gemessene Isotopieverschiebung (Mittelwerte für jede Meßserie) $\Delta\nu(A, A') / \text{mK}$			Ausgeglichene ISV-Werte $\Delta\nu(A, A') / \text{mK}$
	$\lambda=7887\text{\AA}$	$\lambda=8206\text{\AA}$	$\lambda=8231\text{\AA}$	$\lambda=9799\text{\AA}$
124, 129	-3,30(11)	-4,78(9)	-4,78(8)	-5,35
126, 129	-1,35(11)	-2,27(10)	-2,06(10)	-2,39
128, 129	+0,30(21)	-0,18(23)		+0,29
129, 130	-1,49(32)	-1,93(21)		-2,59
129, 132	-3,08(55)	-3,54(15)		-4,24
131, 132	-1,95(12)	-2,02(10)	-2,80(12)	-2,91
129, 134	-4,38(30)	-5,33(15)	-6,06(26)	-6,44
129, 136	-6,22(19)	-7,72(15)	-9,87(8)	-9,84

4.3 Ausgleichsrechnung

Da das eigentliche Ziel der Untersuchungen die Bestimmung der atomkernabhängigen Parameter der ISV ist, können die in Tabelle 4 zusammengestellten Meßergebnisse noch über die untersuchten Spektrallinien gemittelt werden. Dabei hat man allerdings zu beachten, daß die gesuchten Parameter mit unterschiedlichen Gewichten in die ISV der einzelnen Spektrallinien eingehen und daß die verschiedenen Übergänge auch unterschiedliche Masseneffekte besitzen können.

Wie später noch eingehender gezeigt wird, läßt sich für eine Spektrallinie λ die ISV zwischen zwei Isotopen mit den Massenzahlen A und A' gemäß der Beziehung

$$\Delta v_{\text{ISV}, \lambda}^{(A, A')} = \frac{A' - A}{A' \cdot A} K_{\lambda} + F_{\lambda} \cdot C(A, A') \quad (4.3)$$

in einen atomkernabhängigen Parameter $C(A, A')$, die "ISV-Konstante", und die nur durch Hülleneigenschaften bestimmten Größen K_{λ} und F_{λ} zerlegen. Unter Berücksichtigung der Nebenbedingung, daß F_{λ} und K_{λ} für eine bestimmte Spektrallinie und $C(A, A')$ für ein bestimmtes Isotopenpaar konstant sind, kann nach Gl. (4.3) eine Ausgleichung der Meßwerte mit Bezug auf einen der Übergänge erfolgen. In unserem Fall wurde der Übergang $\lambda=9799\text{\AA}$ als Bezugslinie gewählt, weil sich bei diesem Übergang Konfigurationsstörungen am wenigsten auswirken [Lib 69], wodurch die Auswertung der atomkernabhängigen Parameter erleichtert wird.

Die Ergebnisse der Ausgleichsrechnung sind in der letzten Spalte von Tabelle 4 angegeben. Man erkennt, daß sich durch die Ausgleichung (abgesehen von dem Isotopenpaar $^{129,132}\text{Xe}$) die ISV-Werte nur geringfügig gegenüber den Meßwerten für $\lambda=9799\text{\AA}$ ändern, was auf die Selbstkonsistenz der Messungen hinweist.

Die Fehler der ausgeglichenen ISV-Werte sind in Tabelle 4 nicht angegeben; sie liegen zwischen $\pm 0,1$ mK und $\pm 0,2$ mK und enthalten auch die Unsicherheiten der Parameter K_{λ} und F_{λ} .

5. THEORIE DER ISOTOPIEVERSCHIEBUNG

Die Isotopieverschiebung (ISV) in den Spektrallinien von Atomen läßt sich auf eine Verschiebung der an dem optischen Übergang beteiligten atomaren Energieniveaus zurückführen. Auf Grund der Wechselwirkung zwischen Atomkern und Hülle erfährt jeder Term eines Atoms mit Kern von endlicher Masse und endlicher Ausdehnung eine bestimmte Energieverschiebung ΔE gegenüber der Termlage im Falle eines unendlich schweren punktförmigen Kerns. Für zwei verschiedene Isotope eines Elements ist diese Verschiebung ΔE auf Grund der unterschiedlichen Masse und Ausdehnung (bzw. Gestalt) der Kerne im allgemeinen auch unterschiedlich groß. Die Differenz der Energieverschiebungen eines Terms für zwei Isotope mit den Massenzahlen A und A' ($A' > A$) bezeichnet man als die Isotopieverschiebung eines Terms:

$$\delta(\Delta E)_{A,A'} = \Delta E(A') - \Delta E(A) \quad . \quad (5.1)$$

$\delta(\Delta E)$ ist positiv, wenn der zu dem leichteren Isotop (A) gehörige Term im Termschema tiefer liegt als der zu dem schwereren Isotop (A') gehörige Term, vgl. [Sta 66, BK 51].

Als Isotopieverschiebung einer Spektrallinie (gemessen als Wellenzahldifferenz $\Delta \nu$) definiert man die Differenz zwischen der ISV des oberen Terms und der des unteren Terms:

$$\Delta \nu_{\text{ISV}} = \frac{1}{hc} \cdot [\delta(\Delta E)_{\text{oben}} - \delta(\Delta E)_{\text{unten}}] \quad (5.2)$$

mit h : Plancksches Wirkungsquantum,
 c : Lichtgeschwindigkeit.

Auf Grund dieser Definition ist $\Delta \nu_{\text{ISV}}$ dann positiv, wenn die Spektrallinie (Linienschwerpunkt) des Isotops mit der größeren Massenzahl (A') zu größeren Wellenzahlen hin verschoben ist.

Wie in Kapitel 1. bereits erwähnt, ist die beobachtbare Isotopieverschiebung immer die Überlagerung eines massenabhängigen Effektes (ME) und eines volumenabhängigen Effektes (VE), nämlich:

$$\Delta v_{\text{ISV}} = \Delta v_{\text{ME}} + \Delta v_{\text{VE}} \quad . \quad (5.3)$$

In den folgenden Abschnitten wird erläutert, welche atomkernabhängigen Parameter und Eigenschaften der Elektronenhülle zu Δv_{ME} und Δv_{VE} beitragen. Wegen der besonderen Bedeutung für die spätere Auswertung der Messungen wird in einem gesonderten Abschnitt (Abschnitt 5.3) die Frage behandelt, welchen Einfluß Ausdehnung und Gestalt der Kernladungsverteilung auf die ISV besitzen.

5.1 Der massenabhängige Effekt der Isotopieverschiebung

Der massenabhängige Effekt der Isotopieverschiebung, kurz Masseneffekt (ME) genannt, beruht auf der Bewegung eines Atomkerns endlicher Masse um den gemeinsamen Schwerpunkt von Kern und Elektronen der Hülle. Seien H_0 und E_0 der Hamiltonoperator bzw. der zugehörige Energieeigenwert für ein Atom mit unendlicher Kernmasse, dann kommt der Einfluß der Mitbewegung eines Kerns endlicher Masse M im Hamiltonoperator H des realen Atoms durch einen Zusatzterm ΔH zu H_0 zum Ausdruck [Vin 39]:

$$H = H_0 + \Delta H$$

$$\Delta H = \frac{1}{2M} \left(\sum_i \vec{p}_i \right)^2 = \frac{1}{2M} \sum_i p_i^2 + \frac{1}{M} \sum_{i,j>i} \vec{p}_i \cdot \vec{p}_j \quad (5.4)$$

($\vec{p}_i$: Impulsoperator des i -ten Elektrons)

und jedes Energieniveau E des realen Atoms wird gegenüber dem entsprechenden Niveau des Atoms mit unendlicher Masse um einen bestimmten Betrag $\Delta E = E - E_0$ verschoben.

Zum Zwecke der Berechnung teilt man üblicherweise den Masseneffekt auf in den sogenannten "normalen" Effekt, entsprechend dem 1. Term auf der rechten Seite von Gl. (5.4), und den "spezi-fischen" Effekt, entsprechend dem 2. Term in (5.4):

$$\Delta E_{ME} = \Delta E_{\text{norm}} + \Delta E_{\text{spez}} \quad (5.5)$$

Der Beitrag des normalen Masseneffekts zur Energieverschiebung eines Terms läßt sich immer leicht berechnen.

Dazu hat man in E_0 die Elektronenmasse m_e durch die reduzierte Masse $m_r = m_e M / (m_e + M)$ zu ersetzen und erhält als Termverschiebung auf Grund des normalen Effekts:

$$\Delta E_{\text{norm}} = - \frac{m_e}{M} \cdot E_0 \quad (5.6)$$

Für zwei Isotope mit den Massenzahlen A und A' (A' > A) und den Kernmassen M und M' (M' > M) ist der normale Masseneffekt der ISV eines Terms somit gemäß Gl. (5.1):

$$\delta(\Delta E)_{\text{norm}} = \frac{m_e}{M} \cdot E_0 - \frac{m_e}{M'} \cdot E_0 = \left(\frac{1}{A} - \frac{1}{A'} \right) \frac{m_e}{m_u} E_0 \quad (5.7)$$

(mit $M = m_u \cdot A$; m_u : atomare Masseneinheit)

und der normale Masseneffekt der ISV einer Spektrallinie gemäß Gl. (5.2):

$$\Delta \nu_{\text{norm}} = \left(\frac{1}{A} - \frac{1}{A'} \right) \frac{m_e}{m_u} \nu_0 = \frac{A' - A}{A' \cdot A} \frac{m_e}{m_u} \nu_0, \quad (5.8)$$

wenn man die Wellenzahl für den Übergang zwischen zwei Termen eines unendlich schweren Atoms mit

$$\nu_0 = \frac{1}{hc} (E_{0,\text{oben}} - E_{0,\text{unten}})$$

bezeichnet.

Nach Gl. (5.8) ist $\Delta \nu_{\text{norm}}$ positiv. Gemäß der Vorzeichenkonvention bedeutet das, daß in Folge des normalen Masseneffektes der Linienschwerpunkt des Isotops mit der größeren Massenzahl A' immer zu größeren Wellenzahlen hin verschoben wird.

Die Berechnung des spezifischen Masseneffektes ist weitaus schwieriger, da sie die Auswertung des Erwartungswertes des letzten Terms von Gl. (5.4) erforderlich macht und die Kenntnis der einzelnen Elektronen-Eigenfunktionen voraussetzt.

Die Termverschiebung ΔE_{spez} läßt sich nämlich nach Hughes und Eckart [HE 30] und Vinti [Vin 39] als Linearkombination von Vinti-Integralen J^2 darstellen, deren Integrand sich aus den Radialanteilen $R(n,l)$ der Eigenfunktionen zweier Elektronen mit den Quantenzahlen n,l und n',l-1 zusammensetzt [Sto 59]:

$$\Delta E_{\text{spez}} = \frac{m_e hc}{M} \cdot R_{\infty} \sum_{n,n',l} D(l) \cdot J^2(n,l;n',l-1) \quad (5.9)$$

$$\text{mit } J(n,l;n',l-1) = a_0 \cdot \int_0^\infty R(n,l) \left[\frac{d}{dr} - \frac{l-1}{r} \right] R(n',l-1) r^2 dr ,$$

- $D(l)$: Entwicklungskoeffizienten ,
 R_∞ : Rydbergkonstante ,
 a_0 : Bohrscher Radius .

Bei einigen leichteren Elementen hat man versucht, die Ein-elektronen-Wellenfunktionen nach der Hartree-Fock-Methode numerisch zu bestimmen und die Vinti-Integrale auszuwerten [EH 69]. Bei den schwereren Elementen kann man jedoch nach diesem Verfahren (unter anderem in Folge stärker werdender relativistischer Effekte) günstigstenfalls die Größenordnung des spezifischen Masseneffekts bestimmen. Im allgemeinen ist man daher auf Abschätzungen oder halbempirische Verfahren zur Bestimmung des spezifischen Effekts angewiesen.

Trotzdem lassen sich auf Grund der Beziehung (5.9) einige allgemeine Aussagen über den spezifischen Masseneffekt machen:

- alle Elektronen einer Konfiguration können zum spezifischen Masseneffekt beitragen;
- innerhalb einer Konfiguration liefern jeweils zwei Elektronen, deren Bahndrehimpuls sich um $\Delta l = \pm 1$ unterscheidet, einen Beitrag zum spezifischen Masseneffekt;
- für zwei Isotope mit den Massenzahlen A und $A' = A + \Delta A$ ist der spezifische Masseneffekt $\delta(\Delta E)_{\text{spez}}$ eines Terms und ebenso der spezifische Masseneffekt $\Delta \nu_{\text{spez}}$ einer Spektrallinie (vgl. Gl.(5.2)) proportional zu $\Delta A / (A \cdot A')$:

$$\begin{aligned} \delta(\Delta E)_{\text{spez}} &\propto \frac{\Delta A}{A \cdot A'} \\ \Delta \nu_{\text{spez}} &\propto \frac{\Delta A}{A \cdot A'} \end{aligned} \tag{5.10}$$

und sollte daher wie auch der normale Masseneffekt bei den schwereren Elementen klein sein im Vergleich zur gesamten beobachtbaren ISV.

Der totale Masseneffekt einer Spektrallinie ist entsprechend Gl. (5.5) die Summe aus normalem und spezifischem Masseneffekt:

$$\Delta\nu_{\text{ME}} = \Delta\nu_{\text{norm}} + \Delta\nu_{\text{spez}} \quad . \quad (5.11)$$

Nach Gln. (5.8) (5.10) gilt dann:

$$\Delta\nu_{\text{ME}} = \frac{\Delta A}{A \cdot A'} K \quad (5.11a)$$

mit $K=\text{const.}$ für eine bestimmte Spektrallinie.

5.2 Der volumenabhängige Effekt der Isotopieverschiebung

Der volumenabhängige Effekt der Isotopieverschiebung (Volumeneffekt VE) hat seine Ursache in der endlichen Ausdehnung des Atomkerns. Hüllenelektronen, die ins Kerninnere eindringen können (also s-Elektronen und in geringerem Maße $p_{1/2}$ -Elektronen), messen die Abweichung des elektrostatischen Potentials der ausgedehnten Kernladung vom reinen Coulomb-Potential einer Punktladung. Das führt zu einer Zusatzenergie ΔE_{VE} für diese Elektronen, wodurch die Terme um einen entsprechenden Betrag im Termschema nach oben verschoben werden. Ändert sich die Ladungsverteilung von einem Isotop zum anderen, so ändert sich damit auch die Zusatzenergie, was in einer Isotopieverschiebung $\delta(\Delta E)_{VE}$ der Energieniveaus zum Ausdruck kommt. Diese Verschiebung ist proportional zur nichtrelativistischen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(0)|^2$ der Elektronen am Kernort [Sta 66]:

$$\delta(\Delta E)_{VE} = |\psi(0)|^2 \cdot \frac{\pi a_0^3 hc}{Z} \cdot C \quad (5.12)$$

Der Faktor C, die sogenannte Isotopieverschiebungskonstante, hängt nur noch von der Änderung der Kernladungsverteilung von einem Isotop zum anderen ab.

Für den Volumeneffekt einer Spektrallinie ergibt sich durch Einsetzen von (5.12) in (5.2):

$$\Delta \nu_{VE} = - \Delta |\psi(0)|^2 \frac{\pi a_0^3}{Z} \cdot C = F \cdot C \quad , \quad (5.13)$$

wobei $\Delta |\psi(0)|^2$ die Änderung der Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichte beim Übergang vom oberen zum unteren Term bezeichnet:

$$\Delta |\psi(0)|^2 = |\psi(0)|_{\text{unten}}^2 - |\psi(0)|_{\text{oben}}^2 \quad (5.14)$$

Der sogenannte elektronische Faktor F^*) enthält nach Gl. (5.13) nur Eigenschaften der Elektronenhülle des Atoms.

Für die Berechnung der ISV-Konstante C ist die numerische Lösung der Dirac-Gleichung für ein Elektron, das sich im elektrischen Feld einer bestimmten Kernladungsverteilung bewegt, erforderlich. In einer relativistischen Näherungsrechnung, basierend auf einer Theorie von Broch [Bro 45], konnte Bodmer [Bod 53] zeigen, daß C außer von der Kernladungszahl Z nur noch vom mittleren quadratischen Radius $\langle r^2 \rangle$ der Ladungsverteilung $\rho(r)$

$$\langle r^2 \rangle = \int \rho(r) r^2 dV / \int \rho(r) dV \quad (5.15)$$

und dessen Änderung $\delta\langle r^2 \rangle$ von einem Isotop zum anderen abhängt. Bodmer führte ferner einen "Äquivalentradius" R_u der Ladungsverteilung ein, worunter der Radius derjenigen homogen geladenen Kugel zu verstehen ist, die die gleiche Gesamtladung und den gleichen Wert für $\langle r^2 \rangle$ besitzt wie die wahre Ladungsverteilung:

$$R_u^2 = \frac{5}{3} \langle r^2 \rangle \quad (5.16)$$

Nach den Rechnungen von Bodmer [Bod 53, Bod 58, Bod 60] ist die ISV-Konstante C für s-Elektronen damit durch die folgende Beziehung gegeben:

$$C = f(Z) \cdot \delta(R_u^{2\sigma}) \quad (5.17)$$

beziehungsweise

$$C = f(Z, R_u) \cdot \delta\langle r^2 \rangle \quad (5.17a)$$

*) Es sei darauf hingewiesen, daß der elektronische Faktor F hier für eine Spektrallinie und nicht wie in der Literatur auch üblich (z.B. in [Kop 56]) für einen Term des Übergangs definiert wurde!

mit
$$f(Z, R_u) = \frac{5\sigma}{3} R_u^{2\sigma-2} \cdot \sharp(Z) \quad ,$$

$$\sigma = (1 - \alpha^2 Z^2)^{1/2} \quad ,$$

α : Feinstrukturkonstante .

Die Funktion $\sharp(Z)$ ist nach Bodmer bestimmt durch

$$\sharp(Z) = \frac{R_\infty}{\sigma \Gamma^2(2\sigma)} \cdot \frac{\alpha Z + (1+\sigma) \cdot K(\alpha Z)}{\alpha Z + (1-\sigma) \cdot K(\alpha Z)} \cdot \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{2\sigma} \quad . \quad (5.17b)$$

Dabei bezeichnet Γ : die Gammafunktion,

R_∞ : die Rydbergkonstante;

$K(\alpha Z)$ berechnet man in guter Näherung [Bod 60] aus:

$$K(\alpha Z) = -\frac{2}{5} \alpha Z \cdot (1 + 0,106 \alpha^2 Z^2) \quad .$$

Der von einem $p_{1/2}$ -Elektron hervorgerufene Volumeneffekt ist wesentlich geringer als der eines s-Elektrons; nach Fradkin [Fra 62] gilt für das Verhältnis der Termverschiebungen für $np_{1/2}$ -Elektronen und ns -Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl n :

$$v(p_{1/2}) = \frac{\delta(\Delta E)_{np_{1/2}}}{\delta(\Delta E)_{ns}} = \left(\frac{\alpha Z}{1+\sigma}\right)^2 = \frac{1-\sigma}{1+\sigma} \quad . \quad (5.18)$$

Für Xenon ($Z=54$) ist $\sigma \approx 0,92$ und damit $v(p_{1/2}) \approx 0,04$; das bedeutet, daß bei einem $np_{1/2}$ - ns -Übergang der Beitrag des $p_{1/2}$ -Elektrons zum Volumeneffekt der Linie gegenüber demjenigen des s-Elektrons im allgemeinen vernachlässigt werden darf.

5.3 Der Einfluß der Kernladungsverteilung auf den Volumeneffekt der Isotopieverschiebung

Wie im vorangehenden Abschnitt angegeben, ist der Volumeneffekt einer Spektrallinie das Produkt aus zwei Faktoren, einem elektronischen Faktor F , der Eigenschaften der Atomhülle beschreibt, und einem Faktor C , der vom mittleren quadratischen Radius $\langle r^2 \rangle$ der Kernladungsverteilung abhängt.

Es soll nun die Frage behandelt werden, wie sich die Kernladungsverteilung ändert, wenn Neutronen in den Atomkern eingebaut werden. Neben einem "regulären" Anwachsen des Kernvolumens durch die Zunahme der Nukleonenzahl sind verschiedene andere Ursachen für eine Variation von $\langle r^2 \rangle$ denkbar:

- Vergrößerung des effektiven Ladungsradius durch eine bleibende (statische) Deformation des Atomkerns,
- Vergrößerung des effektiven Ladungsradius durch Vibrationen der Kernoberfläche um eine Gleichgewichtsgestalt,
- unterschiedlich starkes Anwachsen des Kernvolumens beim Auffüllen von Neutronenschalen mit verschiedenem Drehimpuls.

Wenden wir uns zunächst dem Einfluß zu, den eine statische Deformation des Atomkerns auf den Volumeneffekt der ISV hat. Betrachtet sei als einfachster Fall eine rotationssymmetrisch deformierte homogene Ladungsverteilung, deren Umrandung sich durch die Gleichung

$$r(\Theta) = r_0 (1 + \beta Y_{20}(\Theta)) \quad (5.19)$$

mit

Θ	:	Polarwinkel bezogen auf die Rotationsachse,
β	:	Deformationsparameter,
Y_{20}	:	Kugelflächenfunktion zweiten Grades,

beschreiben läßt; $\beta Y_{20}(\Theta)$ bezeichne die Abweichung von einer sphärischen Ladungsverteilung mit dem Radius r_0 .

Für eine solche Ladungsverteilung errechnet man als äquivalenten Kugelradius R_u gemäß Gln. (5.15)(5.16) unter Vernachlässigung höherer Potenzen von β :

$$R_u^2 = R_o^2 \cdot \left(1 + \frac{5}{4\pi} \beta^2 \right) \quad (5.20)$$

und als mittleren quadratischen Radius:

$$\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_{\text{sph}} \cdot \left(1 + \frac{5}{4\pi} \beta^2 \right) \quad (5.21)$$

mit R_o : Radius der volumengleichen Kugel und $\langle r^2 \rangle_{\text{sph}} = \frac{3}{5} R_o^2$.
Man kann $\langle r^2 \rangle$ also in einen "sphärischen" Anteil $\langle r^2 \rangle_{\text{sph}}$ und einen "Deformationsanteil" $\langle r^2 \rangle_{\text{def}}$ aufteilen:

$$\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle_{\text{sph}} + \langle r^2 \rangle_{\text{def}} \quad (5.22)$$

$$\text{mit} \quad \langle r^2 \rangle_{\text{def}} = \frac{5}{4\pi} \beta^2 \langle r^2 \rangle_{\text{sph}} .$$

Für den Fall einer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung ($\beta=0$) geht R_u in R_o und $\langle r^2 \rangle$ in $\langle r^2 \rangle_{\text{sph}}$ über.

Führt ein Kern Quadrupolschwingungen um eine Gleichgewichtsgestalt aus und ist die Deformation damit zeitabhängig, so gelten die angestellten Überlegungen genauso, nur hat man in den Formeln die statische Deformation β^2 durch den zeitlichen Mittelwert $\langle \beta^2 \rangle$ zu ersetzen, siehe z.B. [GS 68]. Wir wollen daher zunächst nicht zwischen statischer und dynamischer Deformation unterscheiden; im Falle dynamischer Kerndeformationen denke man sich jeweils β^2 durch $\langle \beta^2 \rangle$ ersetzt.

Für die Änderung des Ladungsradius deformierter Kerne errechnet man aus Gl. (5.20) in der Näherung $\beta^2 \ll 1$:

$$\delta(R_u^{2\sigma}) = \delta(R_o^{2\sigma}) \cdot \left(1 + \frac{5}{4\pi} \delta(\beta^2) \frac{R_o^2}{\delta(R_o^2)} \right) \quad (5.23)$$

und erhält nach Gl. (5.17) für die ISV-Konstante:

$$\begin{aligned} C &= C_{\text{sph}} \cdot \left(1 + \frac{5}{4\pi} \delta(\beta^2) \frac{R_0^2}{\delta(R_0^2)} \right) \\ &= C_{\text{sph}} + C_{\text{def}} \end{aligned} \quad (5.24)$$

mit:

$$C_{\text{sph}} = \sharp(Z) \cdot \delta(R_0^{2\sigma}) \quad , \quad (5.24a)$$

$$C_{\text{def}} = C_{\text{sph}} \frac{5}{4\pi} \delta(\beta^2) \frac{R_0^2}{\delta(R_0^2)} \quad . \quad (5.24b)$$

Um C_{sph} für ein Isotopenpaar numerisch berechnen zu können, muß man die Funktion $\sharp(Z)$ und die Radien R_0 der betrachteten Kerne kennen.

$\sharp(Z)$ wurde von Bodmer [Bod 58], vgl. (5.17b), und anderen Autoren (z.B. [Hum 52, Fra 62, Bab 63]) angegeben.

Für den Kernradius können theoretische Werte $R_{0,\text{th}}$ auf der Grundlage bestimmter Modellvorstellungen über den Atomkern (beispielsweise des Tröpfchenmodells) errechnet werden.

Das häufig benutzte "Standard"-Modell geht von einer kugelförmigen inkompressiblen Ladungsverteilung konstanter Dichte aus. Der Radius einer solchen Ladungsverteilung sollte gemäß

$$R_{\text{std}} = 1,2 \text{ fm} \cdot A^{1/3} \quad (5.25)$$

mit der Nukleonenzahl A anwachsen, vgl. z.B. [Hil 57].

Experimente zur Streuung hochenergetischer Elektronen an Atomkernen haben jedoch gezeigt, daß die Ladungsdichte nur im Inneren der Kerne annähernd konstant ist, daß aber am Kernrand die Ladung mehr oder weniger stark "ausgeschmiert" ist. Die Ergebnisse der Streuexperimente an einer großen Zahl sphärischer und nahezu sphärischer Kerne faßte Elton [Elt 61] in

seiner halbempirischen Formel für die Abhängigkeit des Kernradius von der Massenzahl zusammen. Diese Beziehung, die also auch die "Aufweichung" der Kernoberfläche berücksichtigt, lautet:

$$R_{\text{Elt}} = \{1,123 A^{1/3} + 2,352 A^{-1/3} - 2,070 A^{-1}\} \text{ fm} \quad (5.26)$$

Schließlich werden von verschiedenen Autoren, z.B. [Bod 60, MTE 60, Bab 63], ISV-Konstanten für eine trapezförmige Kernladungsverteilung

$$\rho(r) = \begin{cases} \rho_0 & \text{für } r < a-d \\ \rho_0 \cdot (a+d-r)/2d & \text{für } a-d \leq r \leq a+d \\ 0 & \text{für } a+d < r \end{cases} \quad (5.27)$$

mit der Ladungsdichte ρ_0 im Zentrum des Kerns, dem Halbwert-Radius a und der Oberflächendicke $2d$ berechnet^{*)}. Für den Äquivalentradius einer solchen Verteilung folgt gemäß Gln. (5.15) (5.16):

$$R_{\text{trap}} = \left(\frac{a^4 + \frac{10}{3} a^2 d^2 + d^4}{a^2 + d^2} \right)^{1/2} \quad (5.28)$$

Für die Parameter a und d wurden aus Elektronen-Streuexperimenten die empirischen Werte

$$\begin{aligned} a &= 1,07 \text{ fm} \cdot A^{1/3} \\ d &= 1,49 \text{ fm} \end{aligned} \quad (5.28a)$$

bestimmt [HRH 56].

^{*)} Die Trapez-Verteilung stellt eine etwas schematisierte Form der Fermi-Verteilung dar, die hier nicht näher diskutiert werden soll; vgl. hierzu z.B. [Elt 61].

Mit R_{std} , R_{Elt} und R_{trap} können gemäß

$$\langle r^2 \rangle_{\text{sph,th}} = \frac{3}{5} R_{0,\text{th}}^2$$

bzw. $C_{\text{sph,th}} = \mathfrak{I}(Z) \cdot \delta(R_{0,\text{th}}^{2\sigma})$

theoretische Werte für den mittleren quadratischen Ladungsradius bzw. für die sphärische ISV-Konstante berechnet werden. Sie seien entsprechend dem Modell für die Ladungsverteilung mit $\langle r^2 \rangle_{\text{std}}$, $\langle r^2 \rangle_{\text{Elt}}$ und $\langle r^2 \rangle_{\text{trap}}$ bzw. mit C_{std} , C_{Elt} und C_{trap} bezeichnet.

Die für die stabilen Xenon-Isotope nach den drei genannten Modellen berechneten theoretischen ISV-Konstanten $C_{\text{sph,th}}$ sind in Tabelle 5 in den Spalten 2 bis 4 zusammengestellt. Der Berechnung von $C_{\text{sph,th}}$ liegt die Arbeit von Babushkin [Bab 63] zugrunde, der ebenso wie Bodmer von Brochs Theorie [Bro 45] ausgeht, jedoch für die Bestimmung der Funktion $\mathfrak{I}(Z)$ eigene Elektronen-Wellenfunktionen benutzt.

Für das Standard-Modell und die Trapez-Verteilung wurden die Werte $C_{\text{sph,th}}^{(132,134)}$ und $C_{\text{sph,th}}^{(134,136)}$ direkt der Tabelle von Babushkin [Bab 63] entnommen; die übrigen ISV-Konstanten können gemäß Gl. (5.24a) leicht aus der Beziehung

$$\frac{C_{\text{sph,th}}^{(A,A')}}{\delta(R_{0,\text{th}}^{2\sigma})_{A,A'}} = \frac{C_{\text{sph,th}}^{(134,136)}}{\delta(R_{0,\text{th}}^{2\sigma})_{134,136}} \quad (5.29)$$

bzw. $\frac{C_{\text{Elt}}}{\delta(R_{\text{Elt}}^{2\sigma})} = \frac{C_{\text{std}}}{\delta(R_{\text{std}}^{2\sigma})} \quad (5.29a)$

errechnet werden.

T a b e l l e 5

Zusammenstellung der theoretischen ISV-Konstanten $C_{sph,th}$
für den sphärischen Anteil des Volumeneffekts

Isotopen- paar A, A'	Theoretische ISV-Konstanten $C_{sph,th}^{(A,A')}$ / mK			Fermi-Flüssigkeits-Modell [Bun 67] [KM 67]
	Standard- Modell Gl.(5.25)	Elton- Formel Gl.(5.26)	Trapez- Verteilg. Gl.(5.28)	
124, 126	87,7	76,6	73,3	-
126, 128	87,1	76,1	72,8	-
128, 129	43,4	37,9	36,2	28,2
128, 130	86,6	75,7	72,4	56,4
130, 131	43,1	37,7	36,0	20,2
130, 132	86,1	75,3	71,9	40,4
132, 134	85,6	74,8	71,5	20,2
134, 136	85,1	74,4	71,1	40,4
				57

Der systematische Vergleich der theoretischen ISV-Konstanten für mittelschwere und schwere Elemente mit den im Experiment gefundenen Werten [BK 58, Sta 66] hat gezeigt, daß unter Annahme einer inkompressiblen Ladungsverteilung zwar die durchschnittliche Änderung des effektiven Ladungsradius R_0 mit der Massenzahl A über weite Bereiche des Periodensystems hinweg hinreichend genau beschrieben werden kann, daß jedoch im kleinen Maßstab, innerhalb eines Elements, das Anwachsen von R_0 mit der Neutronenzahl N geringer ist als von den Modellen vorhergesagt. Für das Verhältnis von sphärischem Anteil $C_{\text{sph,exp}}$ der experimentellen ISV-Konstante zur theoretischen ISV-Konstante

$$\eta_{\text{th}} = \frac{C_{\text{sph,exp}}}{C_{\text{sph,th}}} \quad (5.30)$$

wurden, je nach Modell für den Ladungsradius, Werte zwischen 0,5 und 0,9 gefunden. Bei Verwendung des Standard-Modells ist das empirische Verhältnis [Bod 58, Sta 66]:

$$\eta_{\text{std}} = \frac{C_{\text{sph,exp}}}{C_{\text{std}}} = 0,65 \pm 0,1 \quad (5.31)$$

und bei Verwendung der Elton-Formel (Massenzahl $A \approx 130$):

$$\eta_{\text{Elt}} = \frac{C_{\text{sph,exp}}}{C_{\text{Elt}}} = 0,7 \pm 0,1 \quad (5.32)$$

Dieses Abweichen der experimentellen von den theoretischen ISV-Konstanten (in der englischen Literatur als "isotope shift discrepancy" bezeichnet) läßt sich nach Wilets, Hill und Ford [WHF 53] und Bodmer [Bod 58] erklären, wenn man von dem Konzept der inkompressiblen Ladungsverteilung abgeht und statt dessen die Kernmaterie als kompressibel annimmt. Auf Grund der gegenseitigen coulombschen Abstoßung der Protonen im Kern verursacht das Hinzukommen eines Protons zum

Kern dann ein stärkeres Anwachsen des Kernvolumens als das Hinzukommen eines Neutrons.

Bei einem Vergleich der im Experiment bestimmten ISV-Konstanten mit den theoretischen Werten nach einem der drei genannten Modelle muß also noch der "Kompressibilitäts"-Faktor η_{th} nach Gl. (5.30) berücksichtigt werden.

Die Modelle (5.25), (5.26) und (5.28) beschreiben das Anwachsen des Kernvolumens pauschal durch die Zunahme der Nukleonenzahl A , die individuellen Eigenschaften der Nukleonen bleiben jedoch unberücksichtigt. Im Gegensatz dazu haben Bunatyan [Bun 67] und (in einer halb-klassischen Näherung) Krainov und Mikulinskii [KM 67] den Einfluß der Nukleonen-Konfiguration auf die Änderung des effektiven Kernradius R_0 (und damit auf die ISV-Konstante) theoretisch bestimmt. Die Ergebnisse der Rechnungen, die auf dem Fermi-Flüssigkeits-Modell von Migdal [Mig 64] basieren, sind zum Vergleich ebenfalls in Tabelle 5 aufgenommen worden. Über die Verwendbarkeit der verschiedenen Modelle bei der Interpretation der ISV-Messungen wird in einem späteren Abschnitt zu reden sein.

Setzt man jedoch voraus, daß der sphärische Anteil des Volumeneffekts durch eine der genannten Theorien, einschließlich einer evtl. nötigen Korrektur nach Gl. (5.30), richtig wiedergegeben wird, so kann man aus den experimentell bestimmten Volumeneffekten die Änderung des Deformationsparameters β^2 von Isotop zu Isotop ermitteln, denn nach Gl. (5.24) muß jede Abweichung einer experimentellen ISV-Konstante C von der "sphärischen" ISV-Konstante C_{sph} auf eine Änderung der Kerndeformation zurückgeführt werden.

6. INTERPRETATION UND DISKUSSION DER MESSERGEBNISSE

6.1 Vergleich der Meßergebnisse mit Hilfe des King-Diagramms

Wie wir in Kapitel 5. gesehen haben, lassen sich sowohl der Masseneffekt als auch der Volumeneffekt der ISV jeweils als Produkt aus einem nur von der betrachteten Spektrallinie abhängigen Faktor und einem zweiten, nur von dem entsprechenden Nuklidpaar abhängigen Faktor schreiben, vgl. Gl. (5.11a) (5.13). Bezieht man den Masseneffekt der Xenon I-Linien (willkürlich) auf das Isotopenpaar ^{134}Xe und ^{136}Xe , so läßt sich nach Gl. (5.3) die ISV zwischen zwei Isotopen mit den Massenzahlen A und $A'=A+\Delta A$ in einer Spektrallinie (i) durch folgende Gleichung beschreiben:

$$\begin{aligned}\Delta v_{\text{ISV},i}^{(A,A')} &= \Delta v_{\text{ME},i}^{(A,A')} + \Delta v_{\text{VE},i}^{(A,A')} \\ &= \frac{134 \cdot 136}{A \cdot A'} \Delta A \cdot M_i + F_i \cdot C(A,A')\end{aligned}\quad (6.1)$$

Dabei bezeichnen M_i den Masseneffekt je Massenzahldifferenz ΔA für das Isotopenpaar ($A=134, A'=136$), F_i den elektronischen Faktor des Übergangs (i) und $C(A,A')$ die ISV-Konstante. Für eine bestimmte Spektrallinie (i) sind M_i und F_i konstante Größen. Mit der entsprechenden Beziehung für die ISV in einer weiteren Spektrallinie (j) und den reduzierten Größen:

$$\begin{aligned}x_i(A,A') &= \Delta v_{\text{ISV},i}^{(A,A')} / \left(\frac{134 \cdot 136}{A \cdot A'} \Delta A \right) \\ x_j(A,A') &= \Delta v_{\text{ISV},j}^{(A,A')} / \left(\frac{134 \cdot 136}{A \cdot A'} \Delta A \right),\end{aligned}\quad (6.2)$$

ergibt sich der Zusammenhang:

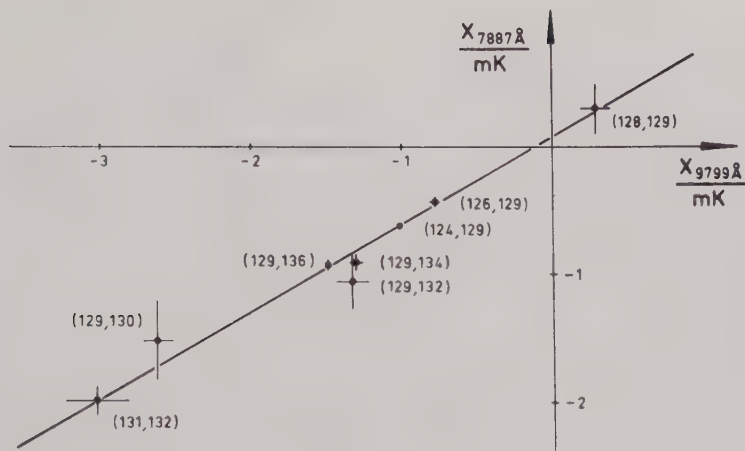
$$x_i(A,A') = a \cdot x_j(A,A') + b \quad (6.3)$$

$$\text{mit } a = F_i/F_j \quad \text{und} \quad b = M_i - (F_i/F_j) \cdot M_j$$

Ist bei zwei Spektrallinien (i) und (j) die ISV für mindestens zwei Isotopenpaare bekannt, so können nach Gl. (6.3) die beiden Größen a und b, also das Verhältnis der elektronischen Faktoren zweier Übergänge und die Differenz zwischen dem Masseneffekt der einen und dem a-fachen Masseneffekt der zweiten Linie, bestimmt werden.

King [Kin 63] schlug zur Auswertung von Gl. (6.3) ein graphisches Verfahren vor: trägt man in einem Diagramm die reduzierten ISV-Werte $x_i(A, A')$ einer Spektrallinie als Ordinatenwerte und die jeweils zum gleichen Isotopenpaar (A, A') gehörigen Werte $x_j(A, A')$ der zweiten Spektrallinie als Abszissenwerte ab, so sollten die entstehenden Punkte gemäß Gl. (6.3) auf einer Geraden, der sogenannten King-Geraden, liegen. Die beiden Größen a und b können dann als Steigung bzw. Ordinatenabschnitt der Geraden dem Diagramm entnommen werden. Dieses Verfahren dient gleichzeitig der Überprüfung der Meßwerte auf ihre Selbstkonsistenz; ist nämlich die ISV für mehr als zwei Isotopenpaare gemessen worden und liegen alle Meßpunkte innerhalb der Meßgenauigkeit auf einer Geraden, so kann man davon ausgehen, daß die Messung frei von systematischen Fehlern ist, vorausgesetzt die Zerlegung des Masseneffekts und des Volumeneffekts gemäß Gl. (6.1) ist zulässig. Die Figuren 8 bis 10 zeigen drei solcher King-Diagramme, in denen die reduzierten ISV-Werte $x_\lambda(A, A')$ der Xenon I-Linien $\lambda=7887\text{\AA}$, $\lambda=8206\text{\AA}$ und $\lambda=8231\text{\AA}$ jeweils gegen die entsprechenden Werte $x_{9799\text{\AA}}$ der Linie $\lambda=9799\text{\AA}$ aufgetragen wurden.

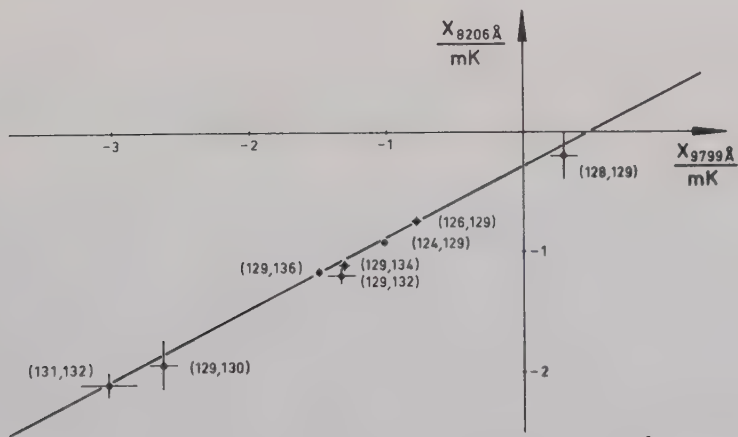
Innerhalb der durch die Fehlerkreuze angedeuteten Meßgenauigkeit liegen die Meßpunkte in allen drei Diagrammen auf Geraden; lediglich die Punkte (129,132) und (129,134) zeigen teilweise eine Abweichung von der ausgleichenden Geraden um etwa eine Fehlerbreite.



Xe I, $6p'[1/2]_0 - 6s'[1/2]_1$, $\lambda = 7887 \text{ Å}$

Xe I, $6p[1/2]_1 - 6s[3/2]_2$, $\lambda = 9799 \text{ Å}$

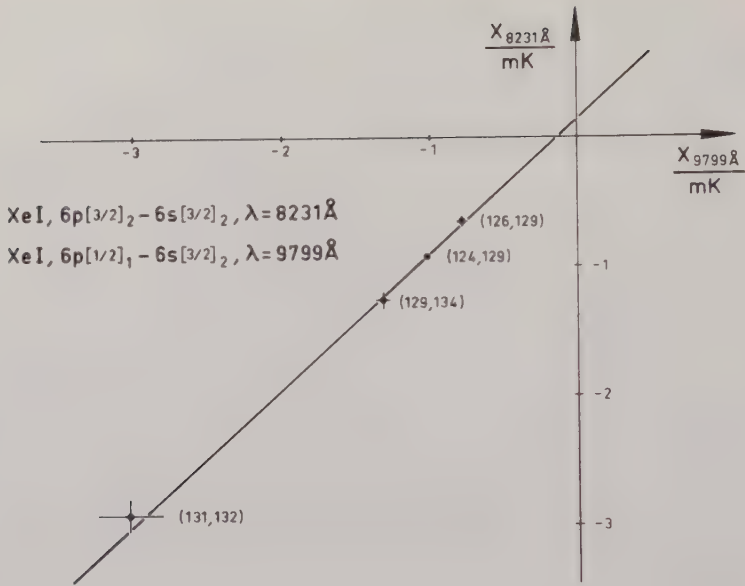
Figur 8



Xe I, $6p'[3/2]_1 - 6s'[1/2]_0$, $\lambda = 8206 \text{ Å}$

Xe I, $6p[1/2]_1 - 6s[3/2]_2$, $\lambda = 9799 \text{ Å}$

Figur 9



Figur 10

Figur 8 bis 10: King-Diagramme für die Xenon I-Linien
 $\lambda = 7887\text{\AA}$ und $\lambda = 9799\text{\AA}$, $\lambda = 8206\text{\AA}$ und $\lambda = 9799\text{\AA}$
 bzw. $\lambda = 8231\text{\AA}$ und $\lambda = 9799\text{\AA}$

Bevor wir versuchen, aus den Achsenabschnitten der King-Geraden Aussagen über die Masseneffekte in den einzelnen Spektrallinien zu gewinnen, wollen wir die Steigungen der King-Geraden mit den theoretisch zu erwartenden Werten vergleichen. Betrachtet man zwei Spektrallinien desselben Elements, so ist die Steigung der King-Geraden nach Gln. (5.13)(6.3) bestimmt durch den Quotienten aus den Änderungen der Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichten in den Übergängen (i) und (j):

$$a = \frac{\Delta |\Psi(0)|_i^2}{\Delta |\Psi(0)|_j^2} \quad . \quad (6.4)$$

Für die hier interessierenden Xenon I-Terme wurden von M. Wilson theoretische Werte für $|\Psi(0)|^2$ nach dem Hartree-Fock-Atommodell berechnet (zitiert in [Vet 70b]). Berücksichtigt man zusätzlich den Einfluß von intermediärer Kopplung und Konfigurationsmischung (siehe Anhang 7.1), so ergeben sich entsprechend Gl. (6.4) die in Tabelle 6 aufgeführten theoretischen Steigungen a_{th} . Ihnen sind die experimentellen Werte a_{exp} gegenübergestellt, die aus den King-Diagrammen (Fig. 8 bis 10) entnommen werden können. Innerhalb der angegebenen Unsicherheiten für a_{exp} stimmen die theoretischen und experimentellen Steigungen der King-Geraden überein. Das zeigt, daß zumindest die relativen Änderungen der Wahrscheinlichkeitsdichten durch die Hartree-Fock-Rechnungen, einschließlich der Korrekturen hinsichtlich der intermediären Kopplung und Konfigurationsmischung, richtig vorausgesagt werden.

T a b e l l e 6

Auswertung der King-Diagramme, bezogen auf die Xenon I-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$, und Vergleich mit Hartree-Fock-Rechnungen von M. Wilson

Wellenlänge $\lambda_i / \text{\AA}$	Hartree- Fock- Rechnung $a_{i,th}$	Auswertung der King-Diagramme			
		$a_{i,exp}$	$b_{i,exp}/mK$	Figur	
7887	0,63	0,70(7)	0,08(8)	8	
8206	0,61	0,60(6)	-0,27(7)	9	
8231	1,00	1,01(13)	0,10(12)	10	

$$a_i = \Delta |\Psi(0)|_i^2 / \Delta |\Psi(0)|_{9799}^2 = F_i / F_{9799} \quad ;$$

$$b_i = M_i - a_i \cdot M_{9799} \quad , \quad \text{entspr. Gl.n. (6.3)(6.4)}$$

6.2 Abschätzung des spezifischen Masseneffekts

Um den Volumeneffekt und damit die Ladungsradius-Änderungen aus den beobachteten Isotopieverschiebungen bestimmen zu können, muß man neben dem (immer exakt berechenbaren) normalen Masseneffekt auch den spezifischen Masseneffekt der einzelnen Übergänge kennen. Die Auswertung der King-Diagramme allein gestattet es jedoch nicht, Aussagen über die absolute Größe des totalen Masseneffekts (und damit des spezifischen Effekts) zu machen. Aus dem Achsenabschnitt der King-Geraden kann man nach Gl. (6.3) jeweils nur die Differenz der Masseneffekte zweier Spektrallinien (i) und (j), nämlich $b = M_i - a \cdot M_j$ entnehmen. Im betrachteten Falle erhält man für die vier untersuchten Xenon-Linien nach der Methode von King also insgesamt 3 Gleichungen für die 4 reduzierten Masseneffekte M_{7887} , M_{8206} , M_{8231} und M_{9799} . Sobald man aber eine weitere unabhängige Aussage über den Masseneffekt eines der Übergänge gewinnen kann, lassen sich damit auch die Masseneffekte der übrigen Übergänge nach der Methode von King ermitteln.

Im folgenden soll daher versucht werden, den Masseneffekt einer der Xenon I-Linien, z.B. $\lambda = 9799 \text{ \AA}$, abzuschätzen. Drei verschiedene Wege, zu einer Abschätzung von M_{9799} zu gelangen, sollen diskutiert werden.

6.2.1 Abschätzung des spezifischen Masseneffekts durch Vergleich der ISV im Xenon I- und Barium II-Spektrum

Bei der Interpretation der gemessenen ISV im Xenon I-Spektrum erweist es sich als nützlich, die Ähnlichkeit des Volumeneffekts bei den Elementen in der Nachbarschaft von Xenon auszunutzen, um zusätzliche Information über den Masseneffekt in den Xenon-Linien zu gewinnen.

Vergleicht man nämlich die Elemente Ruthenium, Palladium, Cadmium und Zinn bzw. Zinn, Tellur, Xenon, Barium und Cer, so findet man zwischen diesen Elementen eine weitgehende Übereinstimmung in der Abhängigkeit der gemessenen Kerndeformationen

von der Neutronenzahl N (siehe Abschnitt 6.5). Es zeigt sich ferner, daß für je zwei Elemente Z und Z' das Verhältnis der gemessenen Volumeneffekte für isotone*) Nuklidpaare innerhalb der Meßgenauigkeit eine Konstante ist [KKS 66, Hüh 71]. Dieser experimentelle Befund und die Tatsache, daß Xenon und Barium 5 stabile isotone Nuklide besitzen, lassen es sinnvoll erscheinen, die ISV im Xenon-Spektrum und im Barium-Spektrum mit Hilfe des in Abschnitt 6.1 beschriebenen King-Diagramms zu vergleichen. Zerlegt man die ISV isotoner Nuklidpaare von Xenon und Barium, $\Delta v_{ISV, Xe}^{(N, N')}$ bzw. $\Delta v_{ISV, Ba}^{(N, N')}$, analog zu Gl. (6.1) in die für einen Xe- bzw. Ba-Übergang konstanten Faktoren M_{Xe} und F_{Xe} bzw. M_{Ba} und F_{Ba} sowie die noch von der Neutronenzahl N abhängigen Anteile und führt man ferner entsprechend Gl. (6.2) die reduzierten Größen $x_{Xe}^{(N, N')}$ bzw. $x_{Ba}^{(N, N')}$ ein, so ergibt sich analog zu Gl. (6.3) der Zusammenhang:

$$x_{Xe}^{(N, N')} = a \cdot x_{Ba}^{(N, N')} + b \quad (6.5)$$

$$\text{mit: } a = \frac{F_{Xe} \cdot C_{Xe}^{(N, N')}}{F_{Ba} \cdot C_{Ba}^{(N, N')}} ,$$

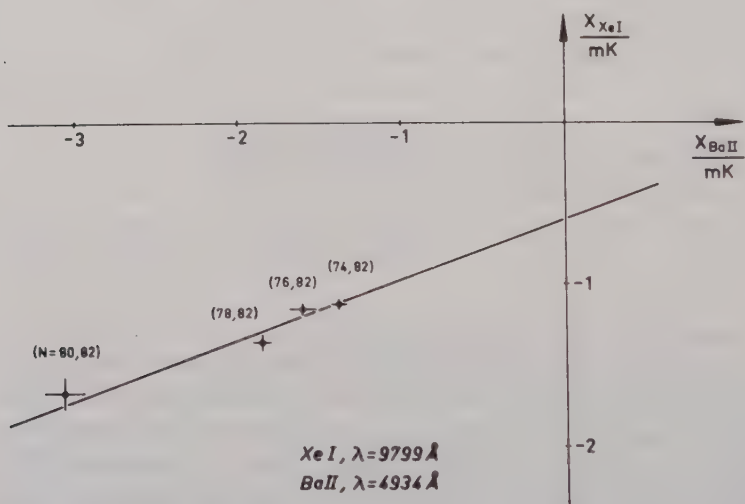
$$b = M_{Xe} - a \cdot M_{Ba} .$$

Da a nach dem oben Gesagten konstant ist, folgt aus der Beziehung (6.5), daß in einem King-Diagramm, in dem die ISV im Xenon- und im Barium-Spektrum verglichen wird, die Punkte isotoner Nuklidpaare auf einer Geraden liegen sollten. Wie Figur 11 zeigt, ist dies auch für die Xenon-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$ (ausgeglichene Werte nach Tabelle 4) und die Barium II-Resonanzlinie $\lambda=4934\text{\AA}$ [Hüh 71] innerhalb der Meßgenauigkeit erfüllt.

Die aus Figur 11 zu entnehmende Steigung der King-Geraden von $a_{\text{exp}} = 0,38 \pm 0,04$ ist in guter Übereinstimmung mit dem theo-

*) Isotone Nuklide sind Nuklide mit gleicher Neutronenzahl N .

retischen Wert $a_{th}=0,38$, den man nach Gl. (6.5) berechnet. In die Berechnung von a_{th} geht in diesem Fall zusätzlich zum Verhältnis der elektronischen Faktoren auch das Verhältnis der ISV-Konstanten für Xenon und Barium ein. Während bei der Bestimmung der elektronischen Faktoren die Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichten wieder aus Hartree-Fock-Rechnungen entnommen wurden (Anhang 7.1 und J. Bauche: private Mitteilung), wurde das Verhältnis C_{Xe}/C_{Ba} mit Hilfe der theoretischen ISV-Konstanten von Babushkin [Bab 63] berechnet.



Figur 11: King-Diagramm für die Xenon I-Linie $\lambda=9799 \text{ \AA}$ und die Barium II-Resonanzlinie $\lambda=4934 \text{ \AA}$

Aus dem Ordinatenabschnitt $b = -0,59(6)\text{mK}$ der King-Geraden (Figur 11) erhält man schließlich mit Gl. (6.5) die folgende Beziehung zwischen den Masseneffekten des Xenon-Übergangs und des Barium-Übergangs:

$$M_{\text{Xe}} = 0,38 \cdot M_{\text{Ba}} - 0,59\text{mK} \quad (6.6)$$

Da es sich beim Barium II-Spektrum um ein alkaliähnliches Spektrum handelt, sollte der spezifische Masseneffekt der Ba II-Linien vernachlässigbar klein sein. Diese Annahme wird durch Vergleich der ISV im elektronischen und myonischen Spektrum des Bariums experimentell bestätigt [Hüh 71]. Nimmt man also an, daß der Masseneffekt in der Ba II-Linie $\lambda=4934\text{\AA}$ nur durch den normalen Effekt verursacht wird, und setzt man den entsprechenden Wert $M_{\text{Ba}} = 0,6 \text{ mK}$ in Gl. (6.6) ein, so erhält man als Masseneffekt in der Xe I-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$:

$$M_{\text{Xe}} = M_{9799} \approx -0,35 \text{ mK} \quad (6.6a)$$

Mit diesem Wert und den Achsenabschnitten b_{exp} der King-Geraden (Tabelle 6) können jetzt auch die Masseneffekte der drei übrigen Xenon-Linien bestimmt werden. Eine Zusammenfassung dieser Ergebnisse wird in Tabelle 7 gegeben.

6.2.2 Abschätzung der Kopplungsintegrale

Eine andere Abschätzung des spezifischen Masseneffekts in den Xenon-Linien stützt sich auf Rechnungen von Stone [Sto 59] zur ISV in den p^5p-p^5s -Übergängen der Edelgase Neon, Argon, Krypton und Xenon.

Nach Gl. (5.2) setzt sich der spezifische Masseneffekt einer Spektrallinie aus der Differenz der spezifischen Effekte im oberen und unteren Term des Übergangs zusammen:

$$\Delta v_{\text{spez}} = \frac{1}{hc} \cdot \left[\delta(\Delta E)_{\text{spez, oben}} - \delta(\Delta E)_{\text{spez, unten}} \right]$$

und ist nach Gln. (5.1)(5.9) also proportional zu einer Linearkombination der Kopplungsintegrale $J^2(n, l; n', l-1)$. Stone teilt nun diese Summe in vier Anteile auf; für die $5p^5 6p-5p^5 6s$ - Übergänge des Xenon I-Spektrums sind dies:

- 1) Kopplung des Leuchtelektrons $6p$ bzw. $6s$ mit den s - bzw. p -Elektronen des Rumpfes

$$\frac{1}{3} \cdot J^2(6p, ns)_{\text{oben}} - J^2(np, 6s)_{\text{unten}}$$

- 2) Kopplung des $5p$ -Loches mit den s -Elektronen des Rumpfes

$$J^2(5p, ns)_{\text{oben}} - J^2(5p, ns)_{\text{unten}}$$

- 3) Kopplung der p - und s -Elektronen innerhalb des Rumpfes

$$J^2(np, n's)_{\text{oben}} - J^2(np, n's)_{\text{unten}}$$

und

- 4) (nur für das untere Niveau der Übergänge)
Kopplung des $5p$ -Loches mit dem $6s$ -Elektron

$$-k \cdot J^2(5p, 6s)_{\text{unten}} \cdot$$

Die Kopplung zwischen d - und p -Elektronen wurde von Stone vernachlässigt. Der Faktor k hängt noch von der Kopplung zwischen $5p$ -Loch und $6s$ -Elektron ab und nimmt für die vier Terme der Konfiguration $5p^5 6s$ unterschiedliche Werte an. Mit den von Faust und McDermott [FM 61] bestimmten Kopplungskonstanten c_1 und c_2 für die intermediäre Kopplung errechnet man folgende Werte für den Kopplungsfaktor k :

$$k = \begin{cases} 1 & \text{für } 6s'[1/2]_0 \quad \text{und } 6s[3/2]_2 \\ 0,73 & \text{für } 6s'[1/2]_1 \\ 0,61 & \text{für } 6s[3/2]_1 \end{cases} \quad (6.7)$$

Durch Anpassung der Parameter 1)...4) an experimentelle ISV-Werte für Xenon und durch Vergleich mit den anderen Edelgasen konnte Stone den Wert für $J^2(5p,6s)$ bestimmen. Bei dieser Anpassung wurde nicht zwischen den einzelnen Termen der Konfiguration $5p^56p$ unterschieden. Trotz der damit verbundenen Vernachlässigung unterschiedlicher Konfigurationsstörungen soll die halbempirische Rechnung von Stone dazu benutzt werden, den Unterschied zwischen den spezifischen Masseneffekten zweier Spektrallinien wenigstens grob abzuschätzen.

Betrachten wir dazu die beiden Übergänge $\lambda=7887\text{\AA}$ und $\lambda=8206\text{\AA}$, die Terme der gleichen Parent-Konfiguration $^2P_{1/2}$ verbinden. Für solche Übergänge kann man in guter Näherung annehmen, daß diejenigen Anteile des spezifischen Effekts, zu denen die Rumpf-Elektronen beitragen (also die Anteile 1)...3)), in beiden Übergängen gleich groß sind. Die spezifischen Effekte in beiden Linien sollten sich lediglich durch die unterschiedlich starke Kopplung zwischen $5p$ -Loch und $6s$ -Elektron unterscheiden. Mit den angegebenen Zahlenwerten für k und dem von Stone [Sto 59] bestimmten Wert des Kopplungsintegrals $J^2(5p,6s)$ berechnet man dann für den Masseneffekt je Nukleonenzahldifferenz in den beiden Linien:

$$M_{7887} - M_{8206} = 0,3 \text{ mK} \quad .$$

Mit dieser Beziehung und den Achsenabschnitten b_{exp} der King-Geraden (Tabelle 6) können nun die Masseneffekte in den vier untersuchten Xenon-Linien bestimmt werden. Die Werte sind in Tabelle 7 zusammengestellt. Sie stimmen in guter Näherung mit denjenigen überein, die durch Vergleich mit dem Barium II-Spektrum gewonnen werden konnten (vgl. Abschnitt 6.2.1).

6.2.3 Beziehung zwischen Volumeneffekt der ISV und der Kern-Bindungsenergie

Eine weitere (indirekte) Methode zur Abschätzung der Masseneffekte wurde von Jackson und Coulombe [JC 70] sowie Vetter [Vet 70b] bei der Auswertung ihrer ISV-Messungen im Xenon I-Spektrum angewandt. Sie benutzten dabei eine Relation zwischen dem Volumeneffekt der ISV und der Kern-Bindungsenergie, die von Gerstenkorn [Ger 69] aufgestellt wurde. Gerstenkorn hatte festgestellt, daß in unmittelbarer Nähe einer magischen Neutronenzahl N eine enge Beziehung zwischen dem Volumeneffekt und der Änderung der Bindungsenergien der betreffenden Kerne besteht, nämlich

$$\frac{\Delta v_{VE}^{(N-4,N)}}{\Delta v_{VE}^{(N-2,N)}} = \frac{E(N-4) - E(N)}{E(N-2) - E(N)} \quad (6.8)$$

E : Bindungsenergie je Nukleon .

Nimmt man an, daß die Änderung des Kernradius von Isotop zu Isotop lokal von der $A^{1/3}$ -Beziehung (5.25) bzw. von der halbempirischen Elton-Formel (5.26) abweicht und in der Umgebung einer magischen Neutronenzahl für den relativen Volumeneffekt die Gerstenkorn-Relation (6.8) gilt, so kann man im Falle von Calcium, Strontium, Barium und Cer die beobachtete "anomale" ISV durch eine entsprechende Variation der Kern-Bindungsenergien erklären [Ger 69]. Für die Isotope ^{136}Xe , ^{134}Xe und ^{132}Xe mit den Neutronenzahlen $N=82$, 80 bzw. 78 erwartet man auf Grund der Relation (6.8) und der gemessenen Bindungsenergien [WG 71] für den relativen Volumeneffekt:

$$\frac{\Delta v_{VE}^{(132,136)}}{\Delta v_{VE}^{(134,136)}} = 1,79 \quad (6.8a)$$

Jede Abweichung des gemessenen Verhältnisses

$$\Delta v_{\text{ISV,exp}}^{(132,136)} / \Delta v_{\text{ISV,exp}}^{(134,136)}$$

von diesem theoretischen Wert ist nach Gerstenkorn auf den Einfluß des Masseneffekts zurückzuführen. Mit dem Verhältnis (6.8a), Gleichung (5.3), der Definition von M_i in Gl. (6.1) und den experimentellen ISV-Werten (Tabelle 4) berechnet man für den Übergang $\lambda=9799\text{\AA}$ einen Masseneffekt je Nukleonenzahldifferenz von

$$M_{9799} = +1,1 \text{ mK} . \quad (6.9)$$

Mit diesem Wert und den Achsenabschnitten b_{exp} der King-Geraden (Tabelle 6) können nun wiederum die Masseneffekte der drei übrigen untersuchten Spektrallinien ermittelt werden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7, Spalte (c) aufgeführt. Sie sind nicht in Übereinstimmung mit denen der beiden erstgenannten Abschätzungen; die spezifischen Masseneffekte nach Methode (c) sind zwar dem Absolutwert nach von der gleichen Größenordnung wie die aus (a) und (b), unterscheiden sich jedoch von diesen im Vorzeichen. Eine Entscheidung darüber, welche der beiden möglichen Annahmen (die positiver oder die negativer Masseneffekte) die sinnvollere ist, kann an dieser Stelle nicht getroffen werden. In der weiteren Diskussion der Meßergebnisse sollen daher gleichberechtigt jeweils beide Möglichkeiten in Betracht gezogen werden.

Wie Tabelle 7 zeigt, können die in den Abschnitten 6.2.1 bis 6.2.3 abgeschätzten Masseneffekte nicht allein durch den normalen Effekt erklärt werden, man muß vielmehr auch einen spezifischen Effekt von etwa der gleichen Größenordnung (positives oder negatives Vorzeichen, je nach Abschätzung) annehmen.

T a b e l l e 7

Abschätzung der Masseneffekte in den Xenon-Übergängen nach drei verschiedenen Methoden

Xenon- Übergang λ / Å	Normaler Masseneffekt $\frac{\Delta v_{\text{norm}, \lambda}}{\Delta N \cdot mK}$	Totaler Masseneffekt $M_{\lambda} = \frac{\Delta v_{\text{ME}, \lambda}}{\Delta N}$ aus den Achsenabschnitten b der King-Geraden (Tabelle 6)	Spezifischer Masseneffekt		
		$\frac{\Delta v_{\text{ME}, \lambda}}{\Delta N \cdot mK}$	(a)	(b)	(c)
7887	+0,4	-0,2	-0,6	-0,6	+0,5
8206	+0,4	-0,5	-0,9	-0,9	0
8231	+0,4	-0,25	-0,65	-0,7	+0,8
9799	+0,3	-0,35	-0,65	-0,7	+0,8

- (a) M_{9799} bestimmt aus dem Vergleich der ISV im Xe I- und Ba II-Spektrum (Fig. 11, Gl. (6.6)),
unter der Annahme: $\Delta v_{\text{spez}}(\text{Ba II}, \lambda = 4934\text{Å}) = 0$;
- (b) $M_{7887}^{M_{8206}}$ bestimmt durch halbempirische Auswertung der Kopplungsintegrale, Abschn. 6.2.2;
- (c) M_{9799} bestimmt mit Hilfe der Gerstenkorn-Relation, Gl. (6.8a) .

6.3 Die experimentelle Isotopieverschiebungskonstante

Die in Abschnitt 5.2, Gl. (5.12), eingeführte Größe C sollte definitionsgemäß nur noch von der Kernladungsverteilung abhängen und für das jeweils betrachtete Isotopenpaar eine Konstante sein. Da in C also weder Hülleneigenschaften noch spezielle Vorstellungen über den Bau der Atomkerne eingehen, läßt sich die gesamte im Spektrum enthaltene Information über die Kernladungsverteilung in einer für das betreffende Isotopenpaar charakteristischen Konstanten, der experimentellen Isotopieverschiebungskonstanten C_{exp} , zusammenfassen.

C_{exp} kann bei Kenntnis der Masseneffekte $\Delta\nu_{\text{ME}}$ und des elektronischen Faktors F nach Gln. (5.3) und (5.13) gemäß

$$C_{\text{exp}} = \frac{\Delta\nu_{\text{VE,exp}}}{F} = \frac{\Delta\nu_{\text{ISV,exp}} - \Delta\nu_{\text{ME}}}{F} \quad (6.10)$$

aus den experimentellen ISV-Werten $\Delta\nu_{\text{ISV,exp}}$ berechnet werden.

Die Masseneffekte der untersuchten Xenon I-Übergänge wurden in Abschnitt 6.2 nach verschiedenen Methoden abgeschätzt. Mit den beiden unterschiedlichen Abschätzungen entsprechend Spalte (a) und (c) von Tabelle 7 bestimmt man aus den gemessenen Isotopieverschiebungen zwei unterschiedliche Wertesätze für den experimentellen Volumeneffekt $\Delta\nu_{\text{VE,exp}}$. Diese sind zusammen mit den jeweiligen relativen Volumeneffekten

$$\rho_{\text{VE}} = \Delta\nu_{\text{VE,exp}}^{(A,A')} / \Delta\nu_{\text{VE,exp}}^{(134,136)}$$

in Tabelle 8, Spalte (2) und (3) bzw. (7) und (8) aufgeführt.

Die Auswertung wurde auf die ausgeglichenen Meßwerte für die Xenon-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$ beschränkt (Tabelle 4, letzte Spalte), da das Ausgleichsverfahren bereits eine Mittelung über die Volumeneffekte aller vier untersuchten Übergänge beinhaltet. Die in Spalte (2) angegebenen Fehler umfassen die Fehler der

ausgeglichenen ISV-Werte und die Unsicherheiten von Δv_{ME} auf Grund des Auswerteverfahrens 6.2.1; die Fehler für die Werte in Spalte (7) werden auf $\pm 2mK$ geschätzt.

Der elektronische Faktor F ist nach Gl. (5.13) proportional zur Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(0)|^2$ der Elektronen bei einem optischen Übergang zwischen zwei Termen, nämlich

$$F = - \Delta |\Psi(0)|^2 \cdot (\pi a_0^3 / Z) \quad . \quad (6.11)$$

Zerlegt man $|\Psi(0)|^2$ in zwei Anteile, den Anteil des Leuchtelektrons und denjenigen des Rumpfes der Elektronenhülle, so ist die Änderung $\Delta |\Psi(0)|^2$ für die $5p^5 6p - 5p^5 6s$ -Übergänge des Xenon-Spektrums entsprechend Gl. (5.14) gegeben durch:

$$\begin{aligned} \Delta |\Psi(0)|^2 &= \{ |\Psi_{6s}(0)|^2 + |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(6s)}^2 \} \\ &\quad - \{ |\Psi_{6p}(0)|^2 + |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(6p)}^2 \} \quad . \end{aligned} \quad (6.12)$$

Die Differenz $\{ |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(ns)}^2 - |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(np)}^2 \}$ ist im allgemeinen von Null verschieden, da sich die Abschirmung der inneren abgeschlossenen Elektronenschalen von der Kernladung ändert, wenn das Leuchtelektron von einer p-Bahn auf eine s-Bahn übergeht, vgl. z.B. [Kop 56]. Definiert man als "Abschirmungsfaktor" das Verhältnis

$$\beta_s = \frac{|\Psi_{ns}(0)|^2 + |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(ns)}^2 - |\Psi(0)|_{\text{Rumpf}(np)}^2}{|\Psi_{ns}(0)|^2} \quad , \quad (6.13)$$

vgl. [BK 71, KW 71], so läßt sich Gl. (6.12) schreiben als:

$$\Delta |\Psi(0)|^2 = \beta_s \cdot |\Psi_{6s}(0)|^2 - |\Psi_{6p}(0)|^2 \quad . \quad (6.14)$$

Nach Fradkin [Fra 62] kann die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi_{np}(0)|^2$ eines np-Elektrons als Bruchteil v der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi_{ns}(0)|^2$ des ns-Elektrons angegeben werden. Somit läßt sich Gl. (6.14) zusammenfassen zu

$$\Delta |\Psi(0)|^2 = (\beta_s - v) \cdot |\Psi_{6s}(0)|^2 \quad (6.15)$$

Da β_s von der Größenordnung 1 ist und v im Falle von Xenon selbst für $p_{1/2}$ -Elektronen nur den Wert 0,04 besitzt (Gl. (5.18)), kann für die Auswertung der Messungen wegen der beschränkten Meßgenauigkeit die Größe v gegenüber β_s vernachlässigt werden:

$$\Delta |\Psi(0)|^2 \approx \beta_s \cdot |\Psi_{6s}(0)|^2 \quad (6.16)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi_{ns}(0)|^2$ eines ns-Leuchtelektrons kann entweder aus Feinstruktur- und Hyperfeinstrukturdaten bestimmt oder aber direkt aus den Elektronen-Eigenfunktionen berechnet werden.

Für alkaliähnliche Elektronenterme liefert die halbempirische Fermi-Segrè-Formel^{*)}

$$|\Psi_{ns}(0)|^2 = \frac{Z Z_a^2}{\pi a_0^3 n_a^3} \cdot \frac{dn_a}{dn} \quad (6.17)$$

- Z_a : effektive Kernladungszahl
($Z_a=1$ für neutrale Atome)
- n : Hauptquantenzahl
- n_a : effektive Hauptquantenzahl

einen Zusammenhang zwischen $|\Psi_{ns}(0)|^2$ und der effektiven Hauptquantenzahl des ns-Terms [Kop 56, Bre 58, Kuh 69].

Aus den Termwerten der Xe I, $5p^5 ns[3/2]_{1,2}$ -Niveaus (nach der

^{*)} Die Fermi-Segrè-Formel wurde ursprünglich für Alkali-Atome abgeleitet; es hat sich jedoch gezeigt, daß sie auch allgemeinere Gültigkeit besitzt.

Tabelle von Ch.E.Moore [Moo 58]) ermittelt man für das 6s-Elektron des Xenon-Atoms:

$$n_a(6s) = 1,90 \quad \text{und} \quad dn_a/dn \approx 1,11$$

und erhält damit aus der Fermi-Segrè-Formel:

$$|\psi_{6s}(0)|^2 = 0,162 \cdot (Z/\pi a_0^3) \quad . \quad (6.18)$$

Eine andere Möglichkeit, die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_{ns}(0)|^2$ des Leuchtelektrons zu bestimmen, besteht in der Auswertung der Hyperfeinstruktur-Aufspaltung eines ungeraden Isotops [Kop 56, BK 51]. Aus dem bekannten Hfs-Aufspaltungsfaktor a_{6s} des 6s-Elektrons, dem magnetischen Kerndipolmoment μ_I sowie dem Kernspin I für das Isotop ^{129}Xe :

$$\left. \begin{aligned} a_{6s}(^{129}\text{Xe}) &= (-149,8 \pm 7,5) \text{mK} && \text{nach [FM 61],} \\ \mu_I(^{129}\text{Xe}) &= -0,77682 \mu_K \\ I(^{129}\text{Xe}) &= 1/2 \end{aligned} \right\} \quad \text{nach Tabelle 2}$$

errechnet man den Wert

$$|\psi_{6s}(0)|^2 = 0,161 \cdot (Z/\pi a_0^3) \quad , \quad (6.19)$$

der (ähnlich wie bei anderen schweren Elementen, vgl. [BK 51]) erstaunlich gut mit dem Wert aus der Fermi-Segrè-Formel übereinstimmt.

Unter Benutzung des aus der Fermi-Segrè-Formel gewonnenen $|\psi_{6s}(0)|^2$, Gl. (6.18), und der Beziehungen (6.10)(6.11)(6.16) kann nun für jedes der untersuchten Isotopenpaare aus dem experimentellen Volumeneffekt die Größe $\beta_s \cdot C_{\text{exp}}$ berechnet werden:

$$\beta_s \cdot C_{\text{exp}} = -\Delta\nu_{\text{VE,exp}} / 0,162 \quad . \quad (6.20)$$

Die Ergebnisse sind in Tabelle 8, Spalte (4) u. (9) zusammengestellt.

T a b e l l e 8

Zusammenstellung der experimentellen Volumeneffekte $\Delta v_{VE,exp}$ für den Übergang Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$, sowie der relativen Volumeneffekte ρ_{VE} und der experimentellen ISV-Konstanten C_{exp} jeweils für die beiden unterschiedlichen Abschätzungen des Masseneffekts

(1) Isotopen- paar A, A'	Angenommener Masseneffekt nach Gl. (6.6a): $(\Delta v_{ME}/\Delta N) = -0,35 \text{ mK}$				Angenommener Masseneffekt nach Gl. (6.9): $(\Delta v_{ME}/\Delta N) = +1,1 \text{ mK}$			
	(2) $\frac{\Delta v_{VE,exp}}{\text{mK}}$	(3) ρ_{VE}	(4) $\beta_s \frac{C_{exp}}{\text{mK}}$	(5) $\frac{C_{exp}}{\text{mK}}$	(6) $\frac{C_{exp}}{\text{mK}}$	(7) $\frac{\Delta v_{VE,exp}}{\text{mK}}$	(8) ρ_{VE}	(9) $\beta_s \frac{C_{exp}}{\text{mK}}$
			(FS)	(FS&HF)	(HF)			(FS)
								(FS&HF)
								(HF)
124, 126	-2,2(2)	0,80	14	12	20	-5,5	0,98	34
126, 128	-1,9(2)	0,70	12	10	17	-5,2	0,93	32
128, 129	+0,7(2)	-0,25	-4	-4	-6	-1,0	0,17	6
128, 130	-1,5(2)	0,55	9	8	14	-4,8	0,85	30
130, 131	+1,6(3)	-0,59	-10	-9	-15	+0,1	-0,02	-1
130, 132	-1,0(3)	0,35	6	5	9	-4,0	0,72	25
132, 134	-1,5(3)	0,55	9	8	14	-4,5	0,79	28
134, 136	-2,7(3)	1	17	15	25	-5,6	1	35

$$\rho_{VE} = \frac{\Delta v_{VE,exp}}{\Delta v_{(134,136)}} = \frac{G(A,A')_{exp}}{G(134,136)_{exp}} ; \quad \begin{array}{l} \text{FS : mit Hilfe der Fermi-Segrè-Formel} \\ \text{HF : aus Hartree-Fock-Rechnungen} \end{array}$$

Da eine exakte Bestimmung des Abschirmungsfaktors β_s im allgemeinen nicht möglich ist, beschränkt man sich bei der Auswertung von ISV-Messungen meistens auf die Angabe der Größe $\beta_s \cdot C_{\text{exp}}$, zumal da oft nur Relativwerte der ISV-Konstanten von Interesse sind. Wenn jedoch, wie im Falle von Xenon, Berechnungen der Elektronen-Wellenfunktionen nach dem Hartree-Fock-Atommodell vorliegen (siehe Anhang 7.1), können diese benutzt werden, um den Abschirmungsfaktor gemäß Gl. (6.13) zu bestimmen [KW 71] und damit die experimentelle ISV-Konstante C_{exp} zu berechnen.

Mit den im Anhang (Tabellen 15 und 16) angegebenen Wahrscheinlichkeitsdichten $|\Psi(0)|^2$ für das 6s-Leuchtelektron und die s-Elektronen des Rumpfes errechnet man für den Xenon I-Übergang $6p[1/2]_1 - 6s[3/2]_2$, $\lambda = 9799\text{\AA}$ nach Gl. (6.13) als Abschirmungsfaktor

$$\beta_s = 1,16 \quad . \quad (6.21)$$

Nach diesen Rechnungen sind also 16% des beobachtbaren Volumeneffekts in dem genannten Übergang auf Abschirmungseffekte der inneren abgeschlossenen Elektronenschalen zurückzuführen. Ähnlich große Abschirmungsfaktoren wurden auch für 6p-6s-Übergänge im Zinn II-Spektrum ($\beta_s = 1,17$ [SS 73]), im Cäsium I-Spektrum ($\beta_s = 1,13$ [FHH 73]) und im Barium II-Spektrum ($\beta_s = 1,12$ [FHH 73]) errechnet.

Unter Verwendung der in Tabelle 8, Spalte (4) und (9) angegebenen Werte für $\beta_s C_{\text{exp}}$ und des oben berechneten Abschirmungsfaktors β_s , Gl. (6.21), können nunmehr die Werte für die reine ISV-Konstante C_{exp} bestimmt werden. Sie sind in den Spalten (5) und (10) von Tabelle 8 aufgeführt. Die Kennzeichnung dieser Werte durch "FS&HF" soll andeuten, daß sie unter Benutzung der Fermi-Segrè-Formel und (lediglich für die Bestimmung von β_s) unter Heranziehen von Hartree-Fock-Rechnungen gewonnen wurden.

Mit den von Wilson nach dem Hartree-Fock-Modell berechneten Elektronen-Eigenfunktionen (vgl. Anhang 7.1) ist es aber nicht

nur möglich, die ISV hinsichtlich des Abschirmungseffektes zu korrigieren, sondern auch - wie bereits erwähnt - den elektronischen Faktor F direkt zu berechnen. Darauf, daß Relativwerte der elektronischen Faktoren, $a=F_i/F_j$, durch die Rechnungen von Wilson richtig wiedergegeben werden, wurde bereits im Abschnitt 6.1 bei der Diskussion der King-Diagramme hingewiesen. Nun sollen die Rechnungen dazu benutzt werden, die Änderung $\Delta|\psi(0)|^2$ der Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichte für einen Übergang und damit den Absolutwert des elektronischen Faktors zu bestimmen. Dazu werden wieder die Werte für $|\psi(0)|^2$ aus Tabelle 16 herangezogen. Nach Gl. (6.11) errechnet man für den elektronischen Faktor des Übergangs Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$:

$$F_{9799} = -0,111 . \quad (6.22)$$

Dieser Wert ist dem Wert

$$F = -\beta_s \cdot 0,162 = -0,188 \quad (6.23)$$

gegenüberzustellen, den man bei Benutzung der Fermi-Segrè-Formel, Gln. (6.17)(6.18), und des Abschirmungsfaktors β_s nach Gl. (6.21) erhält.

Die beiden Werte von F nach (6.22) und (6.23) unterscheiden sich deutlich voneinander. Wie schon von anderen Autoren [Hüh 71, Cha 72] bei dem entsprechenden Vergleich für 6p-6s-Übergänge im Barium II- bzw. Cer II-Spektrum festgestellt wurde, unterschätzen die Hartree-Fock-Rechnungen verglichen mit der Fermi-Segrè-Formel den elektronischen Faktor um 30% ...40%. Dementsprechend sind die nach den Hartree-Fock-Rechnungen mit Gl. (6.22) bestimmten experimentellen ISV-Konstanten C_{exp} für die Xenon-Isotope (Tabelle 8, Spalte (6) und (11)) größer als die mit Hilfe der Fermi-Segrè-Formel ermittelten Werte.

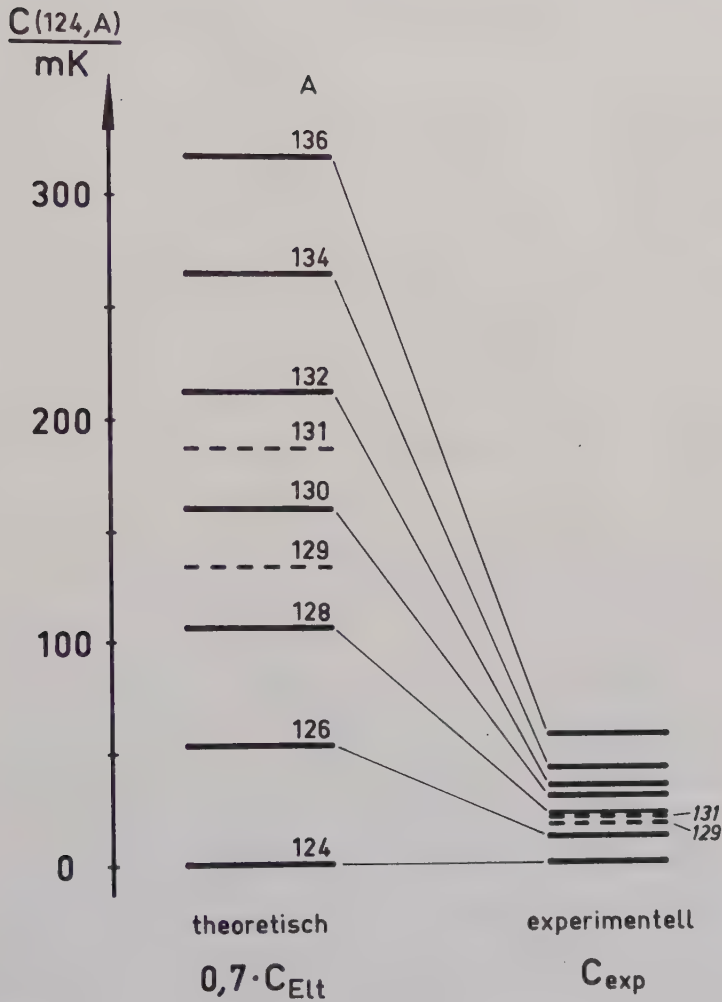
Ein Vergleich der in Tabelle 8 zusammengestellten Werte für C_{exp} mit den theoretischen ISV-Konstanten $C_{\text{sph,th}}$ aus Tabelle 5 zeigt, daß die im Experiment gefundenen ISV-Konstanten

erheblich von den Werten, die man für sphärische Kerne erwartet, abweichen.

Während die auf der Grundlage des Tröpfchen-Modells berechneten theoretischen ISV-Konstanten nur sehr schwach von der Massenzahl A abhängen und mit abnehmendem A monoton anwachsen, variieren die experimentellen Werte ungleichmäßig mit der Massenzahl und sind zudem teilweise um eine Größenordnung kleiner als die theoretischen Werte. Besonders deutlich sind die Abweichungen bei den ungeraden Isotopen ^{129}Xe und ^{131}Xe : die Werte $C_{\text{exp}}^{(128,129)}$ und $C_{\text{exp}}^{(130,131)}$ sind verglichen mit den übrigen C_{exp} viel zu klein und haben teilweise sogar ein anderes Vorzeichen als diese, eine Erscheinung, die man als "odd-even-staggering" bezeichnet. Die Diskrepanz zwischen den experimentellen und theoretischen Werten wird in Figur 12 verdeutlicht. Selbst unter Berücksichtigung des Kompressibilitätsfaktors $\eta_{\text{Elt}} = 0,7 \pm 0,1$ (nach Gl. (5.32)) lassen sich die gemessenen ISV-Konstanten (Tabelle 8, Spalte (5)) und die mit der Elton-Formel berechneten ISV-Konstanten (Tabelle 5) nicht in Einklang bringen.

Auch die Rechnungen von Bunatyan [Bun 67] sowie Krainov und Mikulinskii [KM 67] unter Einbeziehung der Nukleonenkonfigurationen ergeben keine Übereinstimmung mit dem Experiment, insbesondere können auch sie das "odd-even-staggering" nicht erklären. Vielmehr scheint für die Differenzen zwischen C_{exp} und $C_{\text{sph,th}}$ die Deformation der Atomkerne verantwortlich zu sein, deren Einfluß auf die ISV-Konstante durch Gl. (5.24) beschrieben wird.

Die genauere, quantitative Analyse der Deformationseffekte sowie die Diskussion des "odd-even-staggering" erfolgen in einem späteren Abschnitt. Zuvor soll noch erörtert werden, welche Schlüsse aus den experimentellen ISV-Konstanten auf den mittleren quadratischen Ladungsradius $\langle r^2 \rangle$ der Atomkerne gezogen werden können.



Figur 12: Vergleich der experimentellen und theoretischen ISV-Konstanten (willkürlich bezogen auf ^{124}Xe)

6.4 Die Änderung des mittleren quadratischen Ladungsradius

Nach Gl. (5.17a) ist die Beschreibung des gemessenen Volumeneffekts durch die ISV-Konstante C äquivalent einer Beschreibung durch die Änderung $\delta\langle r^2 \rangle$ des mittleren quadratischen Radius der Kernladungsverteilung. Letzteres ist allerdings günstiger, wenn die Ergebnisse der ISV-Messungen mit denen anderer Experimente (z.B. Elektronenstreuung oder Messung der Röntgenspektren myonischer Atome) verglichen werden sollen. Wir wollen daher zu den in Abschnitt 6.3 angegebenen experimentellen ISV-Konstanten C_{exp} auch die zugehörigen Werte für $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ bestimmen. Aus Gln. (5.17a) und (5.24a) ergibt sich zwischen C_{exp} und $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ der Zusammenhang:

$$\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}} = \frac{3}{5} \frac{C_{\text{exp}}}{C_{\text{sph}}} \delta(R_0^2) \quad , \quad (6.24)$$

wenn man berücksichtigt, daß für Xenon wegen $\sigma = 0,92$ und $R_{u,\text{exp}}/R_0 \approx 1$ in sehr guter Näherung $(R_{u,\text{exp}}/R_0)^{2\sigma-2} = 1$ ist. Die so bestimmte Größe $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ ist (im Rahmen der genannten Näherung) ebenso wie die experimentelle ISV-Konstante von der Annahme eines bestimmten Kernmodells unabhängig. Lediglich in der Wahl der Funktion $\Phi(Z)$ für die Berechnung von C_{sph} nach Gl. (5.24a) liegt noch eine gewisse Willkür. Da sich jedoch die von den verschiedenen Autoren [Hum 52, Bod 58, Fra 62, Bab 63] benutzten Funktionen $\Phi(Z)$ für Xenon ($Z=54$) nur um weniger als 5% voneinander unterscheiden, sind die so berechneten Werte für C_{sph} und $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ damit auch praktisch unabhängig von der Wahl von $\Phi(Z)$. Wir benutzen bei der Auswertung nach Gl. (6.24) die nach Babushkin [Bab 63] berechneten theoretischen ISV-Konstanten $C_{\text{sph,th}}$ (Tabelle 5). Entsprechend den verschiedenen experimentellen ISV-Konstanten C_{exp} (Tabelle 8, Spalte (5),(6),(10) u. (11)) ergeben sich für $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ die vier Wertesätze (a),(b),(c) und (d), die in Tabelle 9 zusammengestellt sind.

T a b e l l e 9

Experimentelle und theoretische Werte für die Änderung
des mittleren und quadratischen Ladungsradius $\delta\langle r^2 \rangle$

Isotopen- paar A, A'	Experimentelle Werte				Theoretische Werte
	$\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}} / \text{fm}^2$				$0,6 \cdot \delta\langle r^2 \rangle_{\text{Elt}} / \text{fm}^2$
	(a)	(b)	(c)	(d)	
124, 126	0,031	0,052	0,078	0,133	0,121
126, 128	0,027	0,046	0,073	0,124	0,120
128, 129	-0,009	-0,016	0,013	0,022	0,060
128, 130	0,022	0,037	0,067	0,113	0,120
130, 131	-0,023	-0,039	-0,001	-0,002	0,060
130, 132	0,013	0,022	0,057	0,096	0,119
132, 134	0,021	0,036	0,063	0,107	0,119
134, 136	0,038	0,065	0,079	0,135	0,118

Annahmen über den Masseneffekt Δv_{ME} und den elektronischen
Faktor F:

- (a) $\Delta v_{\text{ME}}(9799\text{\AA}) = -0,35 \text{ mK} \cdot \Delta N$; F = -0,188 ;
 (b) $\Delta v_{\text{ME}}(9799\text{\AA}) = -0,35 \text{ mK} \cdot \Delta N$; F = -0,111 ;
 (c) $\Delta v_{\text{ME}}(9799\text{\AA}) = +1,1 \text{ mK} \cdot \Delta N$; F = -0,188 ;
 (d) $\Delta v_{\text{ME}}(9799\text{\AA}) = +1,1 \text{ mK} \cdot \Delta N$; F = -0,111 .

Den experimentellen Werten sollen nun die theoretischen Werte $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{sph,th}}$ gegenübergestellt werden, die aus den ISV-Konstanten $C_{\text{sph,th}}$ (Tabelle 5) berechnet werden können. Dabei beschränken wir uns auf das Modell, das bei den Elementen in der Nachbarschaft von Xenon, z.B. bei Barium [Hüh 71], die beste Übereinstimmung mit den ISV-Messungen liefert, nämlich die Elton-Formel Gl. (5.26) mit einer zusätzlichen Korrektur η_{Elt} gemäß Gl. (5.32). Bei der Umrechnung von C_{Elt} in $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{Elt}}$ wurde wieder auf die Arbeit von Babushkin [Bab 63] zurückgegriffen. Für den Kompressibilitätsfaktor wurde der Wert $\eta_{\text{Elt}} = 0,6$ gewählt, der auch für Barium ermittelt wurde [FHH 73]. Die theoretischen Werte $0,6 \cdot \delta\langle r^2 \rangle_{\text{Elt}}$ sind in der letzten Spalte von Tabelle 9 angegeben. Auf die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment und deren Interpretation als Deformationseffekt wurde bereits bei der Diskussion der experimentellen ISV-Konstanten hingewiesen.

In der bisherigen Diskussion wurden jeweils die beiden unterschiedlichen Annahmen über den Masseneffekt in den Xenon-Linien, vgl. Gl. (6.6a) und (6.9), in Betracht gezogen, ohne daß eine Entscheidung für eine der beiden Annahmen getroffen werden konnte. Nunmehr ergibt sich eine Entscheidungsmöglichkeit durch den Vergleich der für Xenon gefundenen $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ mit den entsprechenden Werten für die isotonen Nuklide der Nachbar Elemente. Wie die Zusammenstellung der experimentellen Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius für die Elemente Cäsium, Barium, Lanthan und Cer in Tabelle 10 zeigt, findet man nämlich eine überraschend gute Übereinstimmung sowohl in der absoluten Größe von $\delta\langle r^2 \rangle_{\text{exp}}$ für isotone Nuklide als auch in der relativen Änderung dieser Werte mit der Neutronenzahl.

Diese Übereinstimmung ist auch für die isotonen Xenon-Nuklide vorhanden, sofern man von der Annahme eines negativen Masseneffekts entsprechend Gl. (6.6a) ausgeht (Spalte (1) der Tabelle 10).

T a b e l l e 10

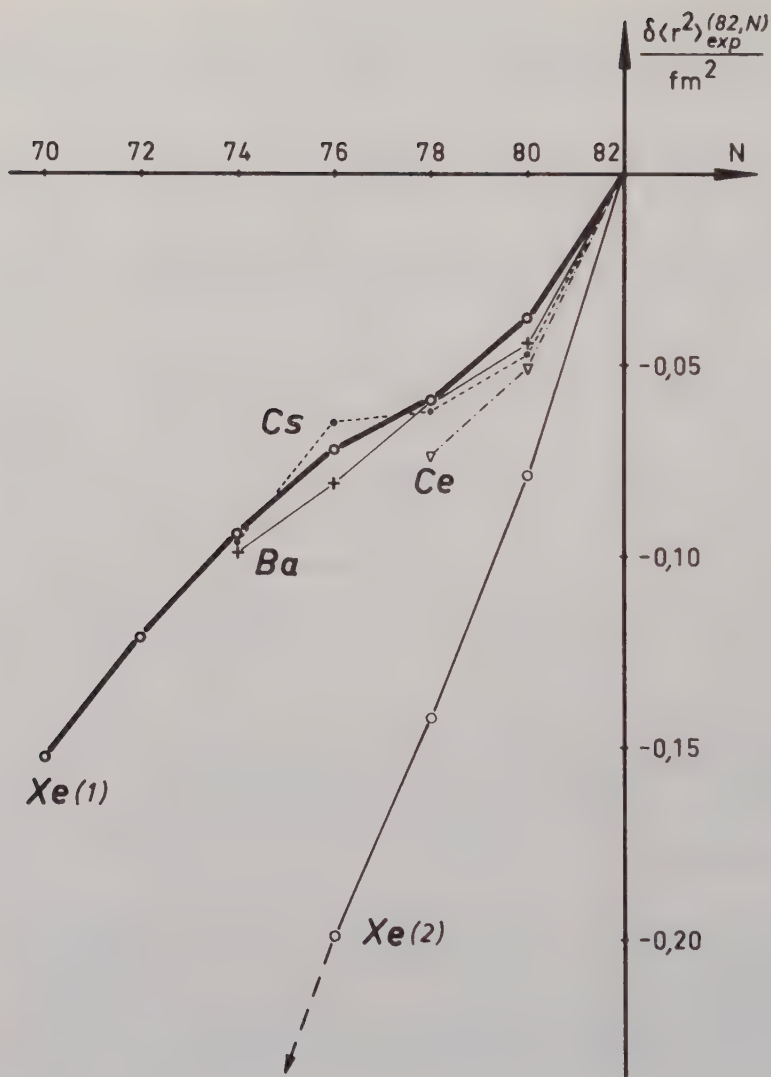
Experimentelle Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius für die Elemente Xenon, Cäsium, Barium, Lanthan und Cer

Neutr.- zahl N,N'	$\delta \langle r^2 \rangle_{\text{exp}} / \text{fm}^2$					
	^{54}Xe (1)	(2)	^{55}Cs (3)	^{56}Ba (4)	^{57}La (5)	^{58}Ce (6)
70,72	0,031	0,078	-	-	-	-
72,74	0,027	0,073	-	-	-	-
74,76	0,022	0,067	0,031	0,018	-	-
76,78	0,013	0,057	0,003	0,021	-	-
78,80	0,021	0,063	0,015	0,016	-	0,023
80,82	0,038	0,079	0,047	0,044	0,059	0,051

(1) nach Tabelle 9, Spalte (a) : $(\Delta v_{\text{ME}}/\Delta N) = -0,35 \text{mK}$
 (2) nach Tabelle 9, Spalte (c) : $(\Delta v_{\text{ME}}/\Delta N) = +1,1 \text{mK}$
 (3), (4) nach [FHH 73]
 (5) nach [Man 72]
 (6) nach [EK 69] und [EV 70]
 Alle Werte stammen aus ISV-Messungen; Auswertung mit Hilfe der Fermi-Segrè-Formel; Abschirmungseffekte wurden berücksichtigt, soweit β_s bekannt ist.

Dagegen ergibt sich bei der Annahme eines positiven Masseneffekts entsprechend Gl. (6.9) keine Übereinstimmung mit den Nachbar-elementen, vgl. Spalte (2). In Figur 13 wird dieser Sachverhalt durch ein Diagramm veranschaulicht.

Dieser empirische Befund veranlaßt uns, den Werten aus Spalte (1), d.h. also der Abschätzung des Masseneffekts nach Gl. (6.6a), den Vorzug zu geben.



Figur 13: Vergleich der Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius isotoner Nuklide von Xenon (o), Cäsium (•), Barium (+) und Cer (▼).

Xe(1) : nach Tabelle 10, Spalte {1}
Xe(2) : nach Tabelle 10, Spalte {2}

6.5 Kerndeformation

Bei der Diskussion der experimentellen ISV-Konstanten und der experimentellen Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius wurde bereits darauf hingewiesen, daß die experimentellen Werte (zum Teil sehr stark) von den für sphärische Kerne berechneten theoretischen Werten abweichen und daß diese Abweichungen auf den Einfluß der Kerndeformation zurückgeführt werden können.

Der gemessene Volumeneffekt $\Delta v_{VE,exp}$ setzt sich gemäß Gl. (5.13)(5.24) aus einem sphärischen und einem Deformationsanteil zusammen:

$$\Delta v_{VE,exp} = F \cdot C_{exp} = F \cdot (C_{sph} + C_{def})_{exp} \quad (6.25)$$

Unter Einführung des Kompressibilitätsfaktors η_{th} nach Gl. (5.30) ergibt sich der Zusammenhang

$$\Delta v_{VE,exp} = F \cdot C_{sph,th} \left(\eta_{th} + \frac{C_{def,exp}}{C_{sph,th}} \right) \quad (6.25a)$$

Ersetzt man schließlich $C_{def,exp}/C_{sph,th}$ entsprechend Gl. (5.24b)(5.16) durch einen Ausdruck in $\langle r^2 \rangle$ und β^2 und löst man nach $\delta(\beta^2)_{exp}$ auf, so erhält man die Beziehung:

$$\delta(\beta^2)_{exp} = \frac{4\pi}{5} \cdot \frac{\delta \langle r^2 \rangle_{sph,th}}{\langle r^2 \rangle_{sph,th}} \left(\frac{\Delta v_{VE,exp}}{F \cdot C_{sph,th}} - \eta_{th} \right), \quad (6.26)$$

nach der aus dem experimentellen Volumeneffekt die Änderung der Kerndeformation bestimmt werden kann.

Die Auswertung nach Gl. (6.26) setzt allerdings die Kenntnis des elektronischen Faktors F voraus. Da jedoch für die hier interessierenden Xenon-Übergänge keine sichere Aussage über die absolute Größe von F gemacht werden kann (für den Übergang Xe I, $\lambda = 9799 \text{ \AA}$ liefert die Fermi-Segrè-Formel den Wert $F = -0,188$, vgl. Gl. (6.23), aus Hartree-Fock-Rechnungen

erhält man dagegen $F = -0,111$, vgl. Gl. (6.22)), wurde für die Bestimmung von $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ ein Verfahren gewählt, für das die explizite Kenntnis von F nicht nötig ist.

Dieses Verfahren, bei dem nur die relativen Volumeneffekte benutzt werden, sei hier kurz erläutert.

Sofern $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ und damit auch $C_{\text{def,exp}}$ für ein Isotopenpaar (1) bereits bekannt sind, kann für ein zweites Isotopenpaar (2) die Größe $\delta(\beta^2)^{(2)}_{\text{exp}}$ über das Verhältnis der gemessenen Volumeneffekte $(\Delta v_{\text{VE,exp}}^{(2)} / \Delta v_{\text{VE,exp}}^{(1)})$ aus dem bekannten $C_{\text{def,exp}}^{(1)}$ bestimmt werden. Dazu geht man von Gl. (6.26) für $\delta(\beta^2)^{(2)}_{\text{exp}}$ aus und ersetzt darin die Größe

$$\frac{\Delta v_{\text{VE,exp}}^{(2)}}{F \cdot C_{\text{sph,th}}^{(2)}}$$

nach Gl. (6.25a) gemäß der Beziehung

$$\frac{\Delta v_{\text{VE,exp}}^{(2)}}{F \cdot C_{\text{sph,th}}^{(2)}} = \frac{\Delta v_{\text{VE,exp}}^{(2)}}{\Delta v_{\text{VE,exp}}^{(1)}} \cdot \frac{C_{\text{sph,th}}^{(1)}}{C_{\text{sph,th}}^{(2)}} \cdot \left(\eta_{\text{th}} + \frac{C_{\text{def,exp}}^{(1)}}{C_{\text{sph,th}}^{(1)}} \right) \quad (6.27)$$

durch einen Ausdruck, der den elektronischen Faktor F nicht mehr explizit enthält.

Für die Bestimmung von $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ nach dieser Methode muß also die Änderung der Kerndeformation für mindestens eines der untersuchten Isotopenpaare aus einem weiteren, unabhängigen Experiment bekannt sein.

Neben der ISV liefert auch die Hfs-Aufspaltung von Spektrallinien Aussagen über die Kerndeformation, allerdings nur für Kerne mit Kernspin $I > 1/2$ [Kop 56], von den stabilen Xenon-Isotopen also nur für ^{131}Xe . Das aus der Hfs bestimmbare, spektroskopische Quadrupolmoment Q_{I} unterscheidet sich vom inneren, auf das körperfeste Koordinatensystem bezogenen Quadrupolmoment Q_0 ("intrinsic" Quadrupolmoment) durch einen Projektionsfaktor, der von der Stärke der Kopplung zwischen

Kernrumpf und Leuchtnukleon abhängig ist. Im Grenzfall starker Rumpf-Teilchen-Kopplung erhält man für den Grundzustand I eines Kerns den Zusammenhang [Her 61]:

$$Q_I = \frac{I \cdot (2I-1)}{(I+1)(2I+3)} \cdot Q_0 \quad . \quad (6.28)$$

Das innere Quadrupolmoment Q_0 kann für eine homogene Ladungsverteilung der Form (5.19) aus dem Deformationsparameter und dem Äquivalentradius R_0 (vgl. (5.20)) berechnet werden; es ergibt sich

$$Q_0 = \frac{3ZR_0^2}{\sqrt{5\pi}} \cdot (\beta + 0,36\beta^2 + \dots) \quad . \quad (6.29)$$

Für ein Isotop mit $I > 1/2$ kann man also nach Gln. (6.28)(6.29) von dem beobachteten spektroskopischen Quadrupolmoment Q_I auf die für den Volumeneffekt der ISV interessierende Größe β^2 schließen. Allerdings liefert eine solche Rechnung nur eine untere Grenze für β^2 des betreffenden Isotops. Ist die Deformation des Kerns nämlich zeitabhängig, so kann man der Hfs-Aufspaltung nur den zeitlichen Mittelwert $\langle Q_0 \rangle$ bzw. $\langle \beta \rangle$ entnehmen, in die Berechnung des Deformationsanteils der ISV geht jedoch die Größe $\langle \beta^2 \rangle > \langle \beta \rangle^2$ ein, vgl. Abschnitt 5.3; lediglich für eine rein statische Deformation des Kerns ist $\langle \beta^2 \rangle = \langle \beta \rangle^2 = \beta^2$.

Abgesehen von der Beschränkung auf ungerade Isotope mit $I > 1/2$ ist aus diesem Grund aus der Hfs-Aufspaltung kein zuverlässiger Wert für $\delta(\beta^2)$ zu gewinnen, mit dessen Hilfe die Gln. (6.26)(6.27) ausgewertet werden könnten.

Eine weitere Möglichkeit, zusätzliche Information über die Kerndeformation der Xenon-Isotope zu gewinnen, bietet der Zusammenhang zwischen innerem Quadrupolmoment Q_0 eines Kerns und der reduzierten Übergangswahrscheinlichkeit $B(E2)$ für

elektrische Quadrupolübergänge zwischen zwei Rotationsniveaus des Kerns.

Für einen erzwungenen Übergang (Coulomb-Anregung) vom Grundzustand 0^+ eines (g,g) -Kerns zum ersten angeregten Zustand 2^+ ist $B(E2)$ proportional zum Quadrat des inneren Quadrupolmoments des Grundzustandes (vgl. z.B. [Mos 57, Sta 66]), nämlich:

$$B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+) = \frac{5}{16\pi} Q_0^2 \quad . \quad (6.30)$$

Nach Gl. (6.29) können den $B(E2)$ -Werten entsprechend

$$B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+) = \left(\frac{3ZR_0^2}{4\pi} \right)^2 \cdot (\beta + 0,36\beta^2)^2 \quad (6.31)$$

also Kerndeformationsparameter β^2 zugeordnet werden.

Ist der Kern nicht statisch deformiert, sondern führt er β -Vibrationen aus, so tritt in Gl. (6.30) an die Stelle von Q_0^2 der zeitliche Mittelwert $\langle Q_0^2 \rangle$ und der $B(E2)$ -Wert ist dementsprechend mit $\langle \beta^2 \rangle$ verknüpft.

Außer aus den Anregungsquerschnitten für Coulomb-Anregung kann das innere Quadrupolmoment Q_0 auch aus der Lebensdauer τ angeregter Kernzustände bestimmt werden. Für einen spontanen Übergang vom ersten angeregten Zustand 2^+ zum Grundzustand 0^+ ist die Übergangswahrscheinlichkeit nämlich

$$B(E2, 2^+ \rightarrow 0^+) = \frac{1}{5} B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+) = \frac{1}{16\pi} Q_0^2 \quad ;$$

für die Berechnung von $B(E2, 2^+ \rightarrow 0^+)$ aus τ siehe z.B. [Her 61].

Für einige der stabilen Xenon-Isotope wurden $B(E2)$ -Werte aus Lebensdauer-Messungen bzw. Coulomb-Anregungsquerschnitten ermittelt; die Meßwerte sind in Tabelle 11 zusammengestellt. Nach Gl. (6.31) kann daraus die Deformation der Kerne berechnet werden. Dazu setzt man für den Radius R_0 in der Literatur, z.B. [SG 65], meistens die Werte nach dem Standard-Modell

Gl. (5.25) ein. Die errechneten Werte für β^2 vermindern sich um etwa 4% (Massenzahl $A=124\dots136$), wenn man statt des etwas groben Standard-Modells eine verfeinerte Form der Ladungsverteilung (Elton-Formel) wählt. Die Deformationen β^2 in der letzten Spalte von Tabelle 11 wurden mit Hilfe von Gl. (6.31) und der Elton-Formel (5.26) aus den experimentellen $B(E2)$ -Werten berechnet.

T a b e l l e 11

Experimentelle Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten $B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+)$ und zugehörige Kerndeformationen β^2

Isotop	Übergangswahrscheinlichkeit $B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+)/ 10^{-48} \text{ cm}^4$		Kerndeformation β^2
	nach [KBP 70]	nach [SG 65]	nach Gl. (6.31) aus $B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+)$
^{126}Xe	-	0,781(50)	0,030(2)
^{128}Xe	0,96(20) ^b	-	0,036(8)
^{130}Xe	0,69(15) ^a	-	0,026(6)
^{132}Xe	0,45(10) ^b	-	0,017(4)

- a) aus Kernresonanz-Streuexperimenten von Kenealy, Beard und Parsons [KBP 70]
- b) berechnet aus dem Wert von a) unter Benutzung der von Pieper, Anderson und Heydenburg [PAH 58] aus Coulomb-Anregungsquerschnitten bestimmten relativen $B(E2)$ -Werte für $^{128,130,132}\text{Xe}$

Diese unabhängig von den ISV-Messungen bestimmten Kerndeformationen können nun dazu dienen, die gemessenen Volumeneffekte entsprechend Gl. (6.26)(6.27) hinsichtlich des Deformationseffektes auszuwerten. Relativ zu den Werten $\delta(\beta^2)^{128,130} = -0,010$ und $\delta(\beta^2)^{130,132} = -0,009$, die man für die Isotopenpaare $^{128,130}\text{Xe}$ und $^{130,132}\text{Xe}$ den B(E2)-Messungen von [KBP 70],

Tabelle 11, entnimmt, lassen sich aus den relativen Volumeneffekten die in Tabelle 12 aufgeführten $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ bestimmen. Die Unsicherheit der $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ auf Grund der experimentellen Unsicherheiten der B(E2)-Werte und der relativen Volumeneffekte beträgt etwa $\pm 0,01$ und liegt also in der Größenordnung der Meßwerte selbst.

Obwohl also über die Änderungen von β^2 nur verhältnismäßig unsichere Aussagen gemacht werden können, erscheint es doch sinnvoll, aus den experimentellen $\delta(\beta^2)$ die absolute Größe der Kerndeformation der einzelnen Xenon-Isotope abzuschätzen. Dazu werden die $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ unter möglichst geringer Abweichung an die aus den B(E2)-Werten ermittelten Deformationen für die Isotope $^{128,130,132}\text{Xe}$ (Tabelle 11) angeschlossen. Die resultierenden Deformationen β^2 für die geraden Xenon-Isotope sind in Tabelle 13, Spalte (b), angegeben. Die Unsicherheit für diese Werte liegt entsprechend den Unsicherheiten von $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ zwischen $\pm 0,01$ und $\pm 0,02$.

Diesen aus der ISV gewonnenen Deformationen sind die mit Hilfe der B(E2)-Werte bestimmten und zur Anpassung benutzten β^2 gegenübergestellt, Spalte (a). Außerdem werden sie mit weiteren experimentellen Werten von Vetter [Vet 72] verglichen, die ebenfalls aus dem Volumeneffekt der ISV, und zwar der ISV der Laser-Linie Xe I, $\lambda = 3,99 \mu\text{m}$, bestimmt und an die in [SG 65] zitierten Deformationen angeschlossen wurden.

Innerhalb der genannten experimentellen Fehlergrenzen stimmen die Deformationen aus Spalte (b) mit den von Vetter angegebenen Werten überein. Letztere sind zwar durchweg um 15%...35% kleiner als die Werte nach (b), zeigen jedoch in Abhängigkeit von der Nukleonenzahl ähnliche relative Änderungen.

T a b e l l e 12

Bestimmung von $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ aus den relativen Volumeneffekten

Isotopen- paar A, A'	Relativer Volumen- effekt $\frac{\Delta v_{VE, \text{exp}}(A, A')}{\Delta v_{VE, \text{exp}}(128, 130)}$	Änderung d. Deformation (I) $\frac{\delta(\beta^2)_{A, A'}_{\text{exp}}}{10^{-3}}$	Relativer Volumen- effekt $\frac{\Delta v_{VE, \text{exp}}(A, A')}{\Delta v_{VE, \text{exp}}(130, 132)}$	Änderung d. Deformation (II) $\frac{\delta(\beta^2)_{A, A'}_{\text{exp}}}{10^{-3}}$	Mittelwert aus (I) u. (II) $\frac{\delta(\beta^2)_{A, A'}_{\text{exp}}}{10^{-3}}$
124, 126	1,40	-9,0	2,32	-3,8	-6,5
126, 128	1,23	-9,3	2,04	-4,9	-7
128, 129	-0,42	-8,1	-0,70	-9,7	-9
128, 130	1 =====	-10,0 =====	1,66	-6,4	-8
130, 131	-1,03	-10,1	-1,71	-13,8	-12
130, 132	0,60	-11,2	1 =====	-9,0 =====	-10
132, 134	0,97	-9,8	1,61	-6,3	-8
134, 136	1,75	-7,1	2,90	-0,9	-4

(I): relativ zu $\delta(\beta^2)_{128, 130} = -0,010$; (II) : relativ zu $\delta(\beta^2)_{130, 132} = -0,009$

T a b e l l e 13

Zusammenstellung experimenteller und theoretischer Deformationsparameter β^2 für die stabilen (geraden) Xenon-Isotope

Isotop	D e f o r m a t i o n s p a r a m e t e r β^2					
	experimentell			theoretisch		
	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
^{124}Xe	-	0,0485	-	0,048	-	0,090
^{126}Xe	-	0,042	(0,036)	0,042	0,041	0,036
^{128}Xe	0,036	0,035	(0,029)	0,034	0,033	0,0285
^{130}Xe	0,026	0,027	0,021	0,025	0,029	0,021
^{132}Xe	0,017	0,017	(0,0135)	-	0,022	0,0135
^{134}Xe	-	0,009	0,006	-	0,018	0,008
^{136}Xe	-	0,005	-	-	0,011	-

Erläuterungen zu den einzelnen Spalten:

- (a) aus Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten $B(E2)$ nach [KBP 70], Tabelle 11;
- (b) aus dem relativen Volumeneffekt der ISV durch Anpassung an die Werte von (a), vgl. Tabelle 12;
- (c) aus dem Volumeneffekt der Linie Xe I, $\lambda=3,99 \mu\text{m}$ [Vet 72] durch Anschluß an die Deformationen nach [SG 65]; letztere sind durch Klammern gekennzeichnet;
- (d) "variable-moment-of-inertia"-Modell: [MSB 69];
- (e) "pairing-plus-quadrupole-force"-Modell: [US 66];
- (f) Nilsson-Modell: [MPS 63].

Nach diesem Vergleich mit anderen Experimenten soll nun die Frage diskutiert werden, ob die aus der ISV bestimmten Werte mit den theoretischen Vorhersagen über die Kerndeformationen verträglich sind.

Mittelschwere (g,g) -Kerne mit Neutronenzahlen im Bereich $35 \leq N \leq 88$ sind im allgemeinen nicht bleibend deformiert; ihr Anregungsspektrum hat nicht die für einen starren Rotator charakteristische Struktur, sondern läßt sich vielmehr durch kollektive Vibrationen der Nukleonen erklären, vgl. z.B. [Mos 57, Her 61]. Man findet aber für diese Kerne eine enge Korrelation zwischen den Anregungsenergien der ersten angeregten Zustände und den Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten zwischen dem Grundzustand und den angeregten Zuständen. Dieser Zusammenhang wird in verschiedenen Theorien [For 53, WHF 53, MSB 69, RB 72] benutzt, um aus den Anregungsenergien die Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten $B(E2)$ bzw. die inneren Quadrupolmomente Q_0 der Grundzustände zu bestimmen.

Die beste Übereinstimmung mit den aus der ISV ermittelten Deformationen liefert das sogenannte "variable-moment-of-inertia" (VMI)-Modell von Mariscotti, Scharff-Goldhaber und Buck [MSB 69]. Durch Auswertung der experimentellen Daten über die angeregten Zustände einer großen Zahl von (g,g) -Kernen konnten die Autoren mit Hilfe ihres VMI-Modells empirische Werte für die Kernträgheitsmomente bestimmen. Sie fanden ferner eine interessante empirische Relation zwischen dem Trägheitsmoment und dem inneren Quadrupolmoment der (g,g) -Kerne. Mit dieser Beziehung und Gl. (6.29) können die Deformationen für die Isotope $^{124,126,128,130}\text{Xe}$ berechnet werden. Die so gewonnenen Werte für β^2 sind in Tabelle 13, Spalte (d) angegeben.

Weitere theoretische Werte können den Rechnungen von Uher und Sorensen [US 66] entnommen werden. Sie beruhen auf dem sogenannten "pairing-plus-quadrupole"-Modell, das den Einfluß von Nukleonen-Paarungseffekten und von Polarisierungseffekten des Kernrumpfes auf die Kernladungsverteilung berücksichtigt. Die durch Anpassung an experimentelle Daten gewonnenen Modellparameter dienen zur Berechnung theoretischer Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten $B(E2)$, aus denen mit Hilfe von Gl. (6.31) theoretische Werte für β^2 bestimmt werden können, siehe Spalte (e) der Tabelle 13. Auch diese errechneten Deformationen sind - bei Berücksichtigung der experimentellen Unsicher-

heiten - mit den aus der ISV gewonnenen Werten (Spalte (b)) in Übereinstimmung.

Schließlich werden zum Vergleich mit dem Experiment Rechnungen von Marshalek, Person und Sheline [MPS 63] herangezogen (Spalte (f)). Diese Rechnungen wurden auf der Grundlage des Nilsson-Modells unter Vernachlässigung von Paar-Wechselwirkung durchgeführt; man erwartet daher, daß sie zwar nicht die absolute Größe, wohl aber den Trend der Deformationen richtig beschreiben.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß die für die geraden Xenon-Isotope aus den ISV-Messungen ermittelten Kerndeformationen^{*)} mit den Werten aus anderen Quellen (sowohl Theorie als auch Experiment) in befriedigender Weise übereinstimmen. Trotz der relativ großen experimentellen Unsicherheiten lassen sich doch folgende Aussagen machen:

- 1) Die Kerndeformation der stabilen Xenon-Isotope gerader Massenzahl nimmt mit steigender Neutronenzahl stetig ab.
- 2) Ihren kleinsten Wert erreicht die Deformation für den "magischen" Kern ^{136}Xe (Neutronenzahl $N=82$). Ein von Null verschiedener Wert von $\langle \beta^2 \rangle$ für diesen Kern läßt sich durch β -Vibrationen um eine kugelförmige Gleichgewichtsge-
stalt erklären.

Zum Schluß soll gezeigt werden, daß die für die Xenon-Isotope ermittelten Deformationen auch gut in die Systematik der Kerndeformation der Nachbarelemente passen. Einen Überblick über die gemessenen Deformationen für Elemente gerader Protonenzahl Z von Ruthenium ($Z=44$) bis Samarium ($Z=62$) gibt Tabelle 14. Abgesehen von den Werten für die Xenon-Isotope, die aus Tabelle 13, Spalte (b) übernommen wurden, wurden die übrigen β^2 -Werte nach Gl. (6.31) aus experimentellen $B(E2)$ -Übergangswahrscheinlichkeiten [SG 65, CH 72] errechnet; für den Äquivalentradius R_0 wurden Zahlenwerte nach der Elton-Formel (5.26) eingesetzt.

*) Gemeint ist hier immer der Erwartungswert $\langle \beta^2 \rangle$, da beim Volumeneffekt der ISV nicht zwischen dem Einfluß von statischer und dynamischer Deformation unterschieden werden kann.

T a b e l l e 14

Zusammenstellung experimenteller Kerndeformationen
für (g,g)-Kerne mit Z=44...62

N	Kerndeformation $\beta^2 \cdot 10^3$										
	⁴⁴ Ru	⁴⁶ Pd	⁴⁸ Cd	⁵⁰ Sn	⁵² Te	⁵⁴ Xe	⁵⁶ Ba	⁵⁸ Ce	⁶⁰ Nd	⁶² Sm	+)
52	21 *)										
54	37 *)										
56	43 *)										
58	54 *)	35	24								
60	64	40	25								
62		45	25	14							
64		52	28								
66			29	11							
68			34	11							
70				10	29	48	69				
72				10	23	42	56				
74				8	20	35	46				
76					16	27					
78					13	17	23				
80						9	14				
82						5	8	10 *)			
84								14	14		
86									21	18	
88									35	33	
90									65	74	

+) aus dem Volumeneffekt der ISV, nach Tabelle 13, Spalte (b);

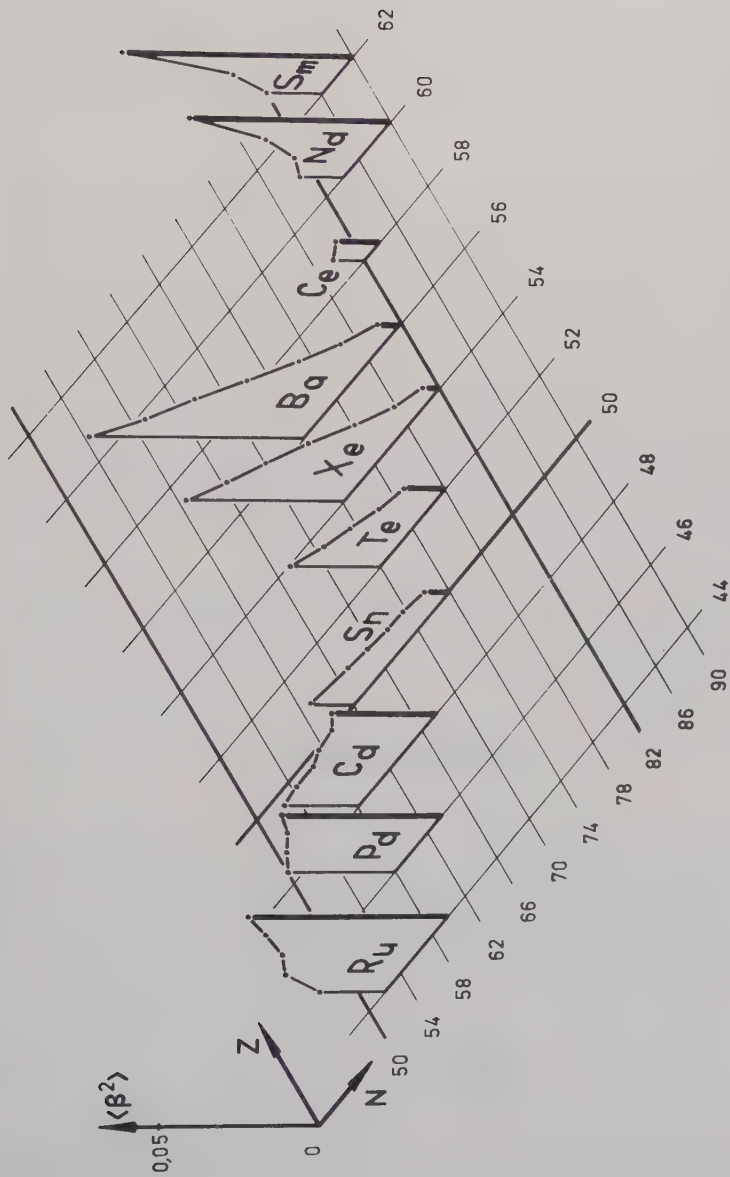
*) aus B(E2)-Werten nach [SG 65];

alle anderen Werte : aus B(E2)-Werten nach [CH 72];

die eingerahmte Zeile und Spalte kennzeichnen die magische Neutronenzahl (N=82) bzw. die magische Protonenzahl (Z=50).

Die Übersicht in Tabelle 14 zeigt deutlich den Einfluß der Schalenstruktur des Kerns auf die Kernladungsverteilung. Noch eindrucksvoller als in der Tabelle kann dieser Einfluß in einer graphischen Darstellung (Figur 14) demonstriert werden: die Kerne mit einer magischen Neutronen- oder Protonenzahl besitzen die kleinsten Deformationen; zu diesen "Tälern" geringster Deformation hin verringert sich die Kerndeformation der übrigen (g,g) -Kerne.

Die aus der ISV bestimmten Deformationen für die geraden Xenon-Isotope passen gut in diese Systematik.



Figur 14: Deformation von (g,g) -Kernen mit $Z=44 \dots 62$

6.6 Odd-even-staggering

Bisher wurde nur die Deformation der geraden Xenon-Isotope diskutiert; von besonderem Interesse sind jedoch auch die Ergebnisse, die man für die ungeraden Isotope ^{129}Xe und ^{131}Xe erhält.

Bei der Diskussion der experimentellen ISV-Konstanten wurde bereits darauf hingewiesen, daß diese Isotope ein starkes "odd-even-staggering" zeigen; das bedeutet, daß das Isotop mit ungerader Neutronenzahl N auf der Wellenzahlskala nicht, wie man bei einem regelmäßigen Anwachsen des Ladungsradius mit der Massenzahl erwarten sollte, in der Mitte zwischen den Isotopen (N-1) und (N+1) liegt, sondern vielmehr in Richtung auf das Isotop (N-1) verschoben ist. Bei den Isotopen ^{129}Xe und ^{131}Xe ist das odd-even-staggering so stark ausgeprägt, daß ihre Linienschwerpunkte (nach Abzug des Masseneffekts) sogar zwischen denen der Isotope ^{126}Xe und ^{128}Xe zu liegen kommen, vgl. Figur 12.

Um eine zahlenmäßige Angabe über die Größe des beobachteten odd-even-staggering machen zu können, definiert man einen "staggering"-Parameter

$$\gamma = \frac{2 \cdot \{v(N) - v(N-1)\}}{v(N+1) - v(N-1)} \quad , \quad (6.32)$$

der die relative Lage des Isotops mit ungerader Neutronenzahl N in Bezug auf die Isotope (N-1) und (N+1) angibt ($\gamma=1$ für ein gegenüber der Sollage nicht verschobenes Isotop). Für die Volumeneffekte Δv_{VE} definiert man analog zu Gl. (6.32) einen Parameter γ_{VE}

$$\gamma_{\text{VE}} = \frac{2 \cdot \Delta v_{\text{VE}}^{(N-1, N)}}{\Delta v_{\text{VE}}^{(N-1, N+1)}} \quad , \quad (6.32a)$$

mit dem die relative Lage der Isotope nach Abzug des Masseneffekts beschrieben wird.

Für die ungeraden Xenon-Isotope bestimmt man nach Gl. (6.32a) mit den experimentellen Volumeneffekten aus Tabelle 8, Spalte (2) oder (3), die "staggering"-Parameter

$$\gamma_{VE}(^{129}\text{Xe}) = -0,9 \pm 0,5 \quad (6.33)$$

und $\gamma_{VE}(^{131}\text{Xe}) = -3,4 \pm 1,7$.

Eine befriedigende theoretische Erklärung des Phänomens "odd-even-staggering" konnte bis jetzt nicht gefunden werden; die bekannten Theorien können den Effekt nur in einigen Fällen qualitativ erklären (siehe hierzu z.B. [Hüh 71]). Das anomale Verhalten der Kerne mit ungerader Neutronenzahl wird verschiedentlich auf den Einfluß der Neutronenkonfiguration zurückgeführt. Die beiden letzten Neutronen eines Kerns mit gerader Neutronenzahl N besitzen im allgemeinen einen höheren Drehimpuls j als das ungepaarte Neutron des Kerns $(N-1)$, da die Paarungsenergie die Besetzung von Termen mit großem j durch ein Neutronenpaar begünstigt. Nimmt man nun an, daß Neutronen mit hohem Drehimpuls j auch ein stärkeres Anwachsen des mittleren quadratischen Ladungsradius $\langle r^2 \rangle$ bewirken als solche mit niedrigem j , so ließe sich damit das odd-even-staggering - zumindest qualitativ - erklären.

Nach Rechnungen von Bunatyan [Bun 67] sowie Krainov und Mikulinskii [KM 67] hat der Drehimpuls des zuletzt eingebauten Neutrons jedoch genau den entgegengesetzten Einfluß auf den Ladungsradius, so daß danach ein kleiner Drehimpuls mit einem großen $\delta \langle r^2 \rangle$ verbunden wäre und umgekehrt. Auf der anderen Seite zeigen Rechnungen von Uher und Sorensen [US 66], basierend auf dem bereits erwähnten "pairing-plus-quadrupole"-Modell, daß der effektive Radius für $3s_{1/2^-}$, $2d_{3/2^-}$ und $1h_{11/2^-}$ -Neutronen nahezu vom Einzelteilchen-Drehimpuls unabhängig ist. Somit kann das starke odd-even-staggering der Xenon-Isotope, die sich ja in der Besetzung der $s_{1/2^-}$, $d_{3/2^-}$ bzw. $h_{11/2^-}$ -Neutronenschale unterscheiden, nach dieser Theorie nicht auf den Einfluß der Neutronendrehimpulse zurück-

geführt werden.

Eine andere Möglichkeit der Interpretation besteht darin, das odd-even-staggering als einen reinen Quadrupoldeformationseffekt zu deuten [WHF 53, Sor 66, RS 71]. Unter der Voraussetzung, daß sich der sphärische Anteil des Volumeneffekts regulär mit der Massenzahl bzw. der Neutronenzahl ändert (z.B. gemäß dem Standard-Modell oder der Elton-Formel), folgt dann aus der beobachteten anomalen ISV der Isotope ungerader Neutronenzahl ("staggering"-Parameter $\gamma_{VE} < 1$), daß der Kern mit ungerader Neutronenzahl N weniger stark deformiert ist, als dem Mittelwert der Deformationen β^2 der beiden benachbarten Kerne $(N-1)$ und $(N+1)$ entspricht:

$$\beta_N^2 < \frac{1}{2} (\beta_{N-1}^2 + \beta_{N+1}^2) . \quad (6.34)$$

Wie groß die quadratische Deformation β^2 - genauer gesagt der Erwartungswert $\langle \beta^2 \rangle$ - für die ungeraden Isotope ^{129}Xe und ^{131}Xe sein müßte, um das beobachtete odd-even-staggering erklären zu können, kann man analog zu den Rechnungen für die geraden Isotope (Abschnitt 6.5) aus den relativen Volumeneffekten bestimmen. Für die Änderung der Deformation gegenüber den benachbarten geraden Isotopen wurden so die Werte

$$\delta(\beta^2)_{\text{exp}}^{128,129} = -0,009$$

$$\text{und } \delta(\beta^2)_{\text{exp}}^{130,131} = -0,012$$

ermittelt (vgl. Tabelle 12). Durch Anschluß an die experimentellen β^2 für die geraden Isotope (Tabelle 13, Spalte (b)) erhält man:

$$\beta^2(^{129}\text{Xe}) = 0,026 ,$$

$$\beta^2(^{131}\text{Xe}) = 0,015 .$$

Damit wären die beiden ungeraden Xenon-Isotope etwa ebenso stark deformiert wie die nächst schwereren geraden Isotope ^{130}Xe und ^{132}Xe (vgl. Tabelle 13, Spalte (a) oder (b)):

$$\beta^2(^{129}\text{Xe}) \approx \beta^2(^{130}\text{Xe}) ,$$

$$\beta^2(^{131}\text{Xe}) \approx \beta^2(^{132}\text{Xe}) .$$

Eine analoge Abschätzung der Deformation der ungeraden Barium-Isotope ^{135}Ba und ^{137}Ba führt zu einem entsprechenden Ergebnis (vgl. [Hüh 71]).

Leider gibt es jedoch keine anderen Hinweise auf die zu erwartende Größe der Deformationen für die genannten (g,u)-Kerne, so daß keine Aussage darüber möglich ist, ob das odd-even-staggering tatsächlich ein reiner Deformationseffekt ist oder ob nicht doch, wenigstens zu einem gewissen Teil, die unterschiedlichen Neutronenkonfigurationen der geraden und ungeraden Kerne die Ursache für die anomalen Isotopieverschiebungen sind. Die einzigen experimentellen Werte, mit denen die aus der ISV abgeschätzten Deformationen der ungeraden Isotope verglichen werden können, sind die spektroskopischen Quadrupolmomente der betreffenden Kerne. Wie in Abschnitt 6.5 bereits erläutert, läßt sich aus dem spektroskopischen Quadrupolmoment Q_I jedoch nur eine untere Grenze für die Deformation β^2 bestimmen. Aus dem Quadrupolmoment für ^{131}Xe

$$Q_I(^{131}\text{Xe}) = -0,120 \cdot 10^{-24} \text{cm}^2$$

(Tabelle 1) errechnet man mit Hilfe der Gln. (6.28)(6.29) den Wert

$$\beta^2(^{131}\text{Xe}) = 0,0015 ,$$

also einen um einen Faktor 10 kleineren Wert als aus der ISV.

6.7 Ausblick

Die Genauigkeit der Angaben hinsichtlich der Änderung des Ladungsradius und der Kerndeformation für die stabilen Xenon-Isotope ist durch die experimentellen Unsicherheiten der ISV-Messungen begrenzt. Aber auch bei wesentlich höherer Meßgenauigkeit würde die Auswertung wegen des nicht exakt bekannten spezifischen Masseneffekts (vgl. Abschnitt 6.2) immer noch mit einer verhältnismäßig großen Unsicherheit behaftet sein. Dieser Mangel könnte behoben werden, wenn der spezifische Masseneffekt mit Hilfe anderer Experimente oder durch verbesserte Rechnungen genauer bestimmt würde, so daß man nicht mehr wie bisher auf Abschätzungen des Masseneffekts angewiesen wäre. Eine Möglichkeit, zu verbesserten Angaben über den Masseneffekt zu gelangen, besteht in der Untersuchung der ISV im Spektrum von myonischen Atomen. Da bei der myonischen ISV kein spezifischer Masseneffekt auftritt [WW 69], kann der spezifische Masseneffekt in den elektronischen Übergängen leicht aus einem Vergleich der ISV im myonischen und elektronischen Spektrum (mit Hilfe eines King-Diagramms) bestimmt werden.

Auch eine theoretische Bestimmung des spezifischen Masseneffekts entsprechend Gl. (5.9) ist denkbar, sobald numerische Werte für die Radial-Wellenfunktionen, beispielsweise nach der Hartree-Fock-Methode, zur Verfügung stehen, mit denen die Kopplungsintegrale für die interessierenden Xenon-Terme ausgewertet werden können.

Neben der Frage, wie sich zuverlässigere Aussagen über Kernradiusänderungen und Deformationseffekte aus der ISV der stabilen Xenon-Isotope gewinnen lassen, ist auch die Frage von Interesse, ob man durch Ausdehnung der ISV-Messungen auf die radioaktiven Xenon-Isotope zusätzliche Information über die Systematik der Kernstruktur in der Umgebung der magischen Neutronenzahl $N=82$ erhält. Die radioaktiven Xenon-Isotope mit gerader Neutronenzahl sind allerdings der konventionellen Methode der optischen Spektroskopie nicht zugänglich, da sie durchweg eine Halbwertszeit von $T_{1/2} \leq 20h$ besitzen und damit für

die Untersuchungen zu kurzlebig sind. Dagegen befinden sich unter den instabilen (g,u)-Kernen fünf, die auf Grund einer hinreichend langen Halbwertszeit Hfs-Untersuchungen mit den auch für die stabilen Isotope benutzten Mitteln gestatten. Es sind dies:

Nuklid	Halbwertszeit $T_{1/2}$
^{127}Xe	36,4 d
$^{129}\text{Xe}^m$	8 d
$^{131}\text{Xe}^m$	11,8 d
^{133}Xe	5,65d
$^{133}\text{Xe}^m$	2,2 d

Eine Untersuchung der Hfs dieser Nuklide könnte, abgesehen von Aussagen über die Kernmomente der betreffenden Kerne, aufschlußreiche Ergebnisse hinsichtlich des odd-even-staggering liefern. So könnte möglicherweise geklärt werden, ob das odd-even-staggering durch die Neutronenkonfiguration beeinflusst wird (vgl. Diskussion Abschnitt 6.6); wenn dies der Fall ist, sollte man dementsprechende Unterschiede in der ISV zwischen den isomeren Nukliden $^{129}\text{Xe}^m$, $^{131}\text{Xe}^m$ und $^{133}\text{Xe}^m$ und ihren Grundzuständen feststellen können, da sich das ungepaarte Neutron bei den angeregten Kernen in einem $h_{11/2}$ -Zustand, bei den Grundzuständen jedoch in einem $s_{1/2}$ - bzw. $d_{3/2}$ -Zustand befindet. (Die Auswertung solcher "Isomerie-Verschiebungen" wird dadurch erleichtert, daß keine Masseneffekte auftreten können.)

Für die Herstellung der genannten Radio-Nuklide kommen verschiedene Prozesse in Frage: ^{127}Xe , $^{129}\text{Xe}^m$ und $^{131}\text{Xe}^m$ können durch Bestrahlung der stabilen Nuklide ^{126}Xe , ^{128}Xe und ^{130}Xe mit Reaktor-neutronen aus (n, γ)-Reaktionen gewonnen werden; ^{127}Xe läßt sich ferner durch Zyklotron-Bestrahlung über eine (d,2n)-Reaktion aus dem Reinelement Jod herstellen; die Nuklide ^{133}Xe und $^{133}\text{Xe}^m$ schließlich erhält man als Spaltprodukte.

7. ANHANG

7.1 Zur Berechnung der Elektronen-Wahrscheinlichkeitsdichten

Die Berechnung der nichtrelativistischen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(0)|^2$ der Elektronen am Kernort kann, wie in Kapitel 6. bereits erwähnt, mit Hilfe von Feinstruktur- und Hyperfeinstruktur-Daten oder aber direkt aus dem Radialteil der Elektronen-Eigenfunktionen eines geeigneten Atommodells berechnet werden. Die Angabe von Zahlenwerten für die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\Delta|\Psi(0)|^2$ sowie für den Abschirmungsfaktor β_s in Kapitel 6. stützt sich auf Hartree-Fock-Rechnungen von Wilson [Wil 68]. Wilson errechnete für verschiedene Xenon I-Konfigurationen, darunter $5p^5 6s$, $5p^5 5d$, $5p^5 6p$ und $5p^5 7p$, die Beiträge $|\Psi_{ns}(0)|^2$ der einzelnen ns-Elektronen ($n=1\dots 5$ bzw. 6) zur totalen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(0)|^2$. Die numerischen Werte für $|\Psi_{ns}(0)|^2$ und

$$|\Psi(0)|^2 = \sum_n q_n \cdot |\Psi_{ns}(0)|^2 \quad ,$$

wobei q_n die Besetzungszahl der ns-Schale bezeichnet ($q_n=2$ für eine volle ns-Schale, $q_n=1$ für eine halbvolle Schale), wurden der Arbeit von Vetter [Vet 70b] entnommen und sind in Tabelle 15 aufgeführt.

Für die Konfiguration $5p^5 6s$, die den wesentlichen Beitrag zum Volumeneffekt der untersuchten Spektrallinien liefert, ermittelte Wilson unter Benutzung des LS-Kopplungsschemas unterschiedliche Wahrscheinlichkeitsdichten für die Terme $6s \ ^1P$ und $6s \ ^3P$. Diese Werte können mit Hilfe der numerisch bekannten Kopplungskonstanten c_1 und c_2 [FM 61] auf die wahren Kopplungsverhältnisse umgerechnet werden. Wir benutzen zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Term $5p^5 6s[k]_J$ die Transformationsgleichung:

$$|\Psi(0)|^2_{(6s[k]_J)} = c_1 \cdot |\Psi(0)|^2_{(1P)} + c_2 \cdot |\Psi(0)|^2_{(3P)} \quad . \quad (7.1)$$

T a b e l l e 15

Beiträge der einzelnen s-Elektronen zur totalen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(0)|^2$
für die Konfigurationen Xe I, $5p^56s$, $5p^55d$, $5p^56p$ und $5p^57p$

Term	$5p^56s$ $1p$	$5p^56s$ $3p$	$5p^55d$ (Mittelw.)
$4\pi a_0^3 \cdot \psi_{ns}(0) ^2$	1s 617 433, 2797 2s 65 277, 5780 3s 13 054, 9902 4s 2 716, 3619 5s 356, 9004 6s 15, 4117	617 433, 3268 65 277, 6240 13 055, 0900 2 716, 4014 356, 6615 20, 8539	617 432, 9716 65 277, 5146 13 054, 8787 2 716, 0708 354, 9624 -
$4\pi a_0^3 \cdot \sum_{n=1}^{n=6} q_n \psi_{ns}(0) ^2$	1 397 693, 6321	1 397 698, 8413	1 397 672, 7962
Term	$5p^56p$ (Mittelw.)	$5p^57p$ (Mittelw.)	
$4\pi a_0^3 \cdot \psi_{ns}(0) ^2$	1s 617 432, 7972 2s 65 277, 4855 3s 13 054, 9198 4s 2 716, 1114 5s 355, 9385	617 433, 6851 65 277, 4916 13 054, 9422 2 716, 1482 356, 1843	
$4\pi a_0^3 \cdot \sum_{n=1}^{n=5} q_n \psi_{ns}(0) ^2$	1 397 674, 5048	1 397 676, 9028	

nach Hartree-Fock-Rechnungen von M. Wilson, zitiert in [Vet 70b];
 q_n : Besetzungszahl der ns-Schale

Die Kopplungskonstanten c_1 und c_2 für die 6s-Terme sowie die damit errechneten Werte von $|\psi(0)|^2$ sind in Tabelle 16 angegeben.

Schließlich können die Wahrscheinlichkeitsdichten hinsichtlich der Konfigurationsstörungen der Terme korrigiert werden. Liberman [Lib 69] stellte fest, daß die $5p^5 6s$ - und $5p^5 6p$ -Terme nicht rein sind, sondern mehr oder weniger stark durch 5d- bzw. 7p-Terme gestört werden. Bei Kenntnis der Termreinheiten ζ [Lib 69] und unter der Annahme, daß als Störterme nur 5d- bzw. 7p-Terme in Frage kommen, kann der Einfluß der Konfigurationsmischung $5p^5(6s+5d)$ bzw. $5p^5(6p+7p)$ durch folgende Beziehung für die Störung eines $n l$ -Terms durch einen $n' l'$ -Term berücksichtigt werden:

$$|\psi(0)|_{(n l + n' l')}^2 = \zeta \cdot |\psi(0)|_{(n l)}^2 + (1 - \zeta) \cdot |\psi(0)|_{(n' l')}^2 \quad (7.2)$$

Die benutzten Werte für die Termreinheiten sowie die nach Gl. (7.2) berechneten $|\psi(0)|^2$ sind in Tabelle 16 zusammengestellt.

Mit diesen sowohl hinsichtlich intermediärer Kopplung als auch Konfigurationsstörungen korrigierten Werten von $|\psi(0)|^2$ läßt sich nun die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte, $\Delta|\psi(0)|^2$, bei den untersuchten Übergängen berechnen; für den Übergang $6p[1/2]_1 - 6s[3/2]_2$, $\lambda = 9799 \text{ \AA}$ beispielsweise ist nach Gl. (5.14):

$$\begin{aligned} \Delta|\psi(0)|_{(9799 \text{ \AA})}^2 &= |\psi(0)|_{(6s[3/2]_2)}^2 - |\psi(0)|_{(6p[1/2]_1)}^2 \\ &= (1397698,50 - 1397674,60) / 4\pi a_0^3 \\ &= 23,90 / 4\pi a_0^3 \quad . \end{aligned}$$

Analog dazu kann auch für die übrigen Spektrallinien ein Wert für $\Delta|\psi(0)|^2$ bestimmt werden. Die relativen Unsicherheiten in $\Delta|\psi(0)|^2$ auf Grund der Unsicherheiten der Kopplungskonstanten, der Termreinheiten, auf Grund unvollständiger Termanalyse sowie der Benutzung eines Mittelwertes von $|\psi(0)|^2$ für die $5p^5 6p$ -Terme werden auf insgesamt etwa 10% geschätzt.

Totale Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(0)|^2$ für die $5p^56s$ -Terme und einige $5p^56p$ -
Terme nach Berücksichtigung von intermediärer Kopplung u. Konfigurationsmischung

Term	Kopplungs- konstanten nach [FM 61]	Intermediäre Kopplung GL. (7.1)	Term- reinheit [Lib 69]	Konfigurationsmischung $5p^5(6s+5d)$ bzw. $(6p+7p)$ GL. (7.2)
	c_1 c_2	$4\pi a_0^3 \cdot \psi(0) ^2$	ζ	$4\pi a_0^3 \cdot \psi(0) ^2$
$5p^56s, [1/2]_1$	0,592 0,408	1 397 696,72	0,72	1 397 690,02
$5p^56s, [1/2]_0$	0 1	1 397 698,84	0,659	1 397 689,96
$5p^56s, [3/2]_1$	0,408 0,592	1 397 695,76	0,984	1 397 695,39
$5p^56s, [3/2]_2$	0 1	1 397 698,84	0,987	1 397 698,50
$5p^56p, [1/2]_0$			0,835	1 397 674,90
$5p^56p, [3/2]_1$			0,652	1 397 675,34
$5p^56p, [3/2]_2$			0,918	1 397 674,70
$5p^56p, [1/2]_1$			0,96	1 397 674,60

(weitere Erläuterungen im Text)

7.2 Verzeichnis häufig benutzter Abkürzungen und Symbole

A	Massenzahl (Nukleonenzahl)
a_0	Bohrscher Radius
α	Feinstrukturkonstante
β	Deformationsparameter
β_s	Abschirmungsfaktor
C	Isotopieverschiebungs-Konstante
c	Lichtgeschwindigkeit
η	Kompressibilitätsfaktor der Kernmaterie
F	elektronischer Faktor des Volumeneffekts
Hfs	Hyperfeinstruktur
h	Plancksches Wirkungsquantum
I	Kern Drehimpulsquantenzahl (Kernspin)
ISV	Isotopieverschiebung
λ	Wellenlänge
ME	Masseneffekt
m_u	atomare Masseneinheit
μ_I	magnetisches Kerndipolmoment
μ_K	Kernmagneton
μ_B	Bohrsches Magneton
N	Neutronenzahl
ν	Wellenzahl

Q_I	elektrisches Kernquadrupolmoment
Q_O	inneres ("intrinsic") Kernquadrupolmoment
R_∞	Rydberg-Konstante
R_u	Äquivalentradius der Kernladungsverteilung
$\langle r^2 \rangle$	mittlerer quadratischer Radius der Kernladungsverteilung
VE	Volumeneffekt
Z	Kernladungszahl (Ordnungszahl)
$ \psi(0) ^2$	Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen am Kernort

7.3 Tabellenverzeichnis

	Seite
Tabelle	
1 Einige charakteristische Daten der stabilen Xenon-Isotope	8
2 Gemessene und berechnete Hfs-Aufspaltungsfaktoren A und B für einige $5p^{56}s$ - und $5p^{56}p$ -Terme des Xenon I-Spektrums	15
3 Relative Häufigkeiten der Xenon-Isotope in einigen der benutzten angereicherten Isotopenproben und im natürlichen Gemisch	21
4 Gemessene Isotopieverschiebung in den vier untersuchten Xenon I-Linien und ausgeglichene ISV-Werte für die Linie $\lambda=9799\text{\AA}$	36
5 Zusammenstellung der theoretischen ISV-Konstanten $C_{\text{sph,th}}$ für den sphärischen Anteil des Volumeneffekts	52
6 Auswertung der King-Diagramme, bezogen auf die Xenon I-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$, und Vergleich mit Hartree-Fock-Rechnungen von M. Wilson	59
7 Abschätzung der Masseneffekte in den Xenon-Übergängen nach drei verschiedenen Methoden	68
8 Zusammenstellung der experimentellen Volumeneffekte $\Delta v_{\text{VE,exp}}$ für den Übergang Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$, sowie der relativen Volumeneffekte ρ_{VE} und der experimentellen ISV-Konstanten C_{exp} jeweils für die beiden unterschiedlichen Abschätzungen des Masseneffekts	73
9 Experimentelle und theoretische Werte für die Änderung des mittleren quadratischen Ladungsradius $\delta\langle r^2 \rangle$	79

Tabelle	Seite
10 Experimentelle Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius für die Elemente Xenon, Cäsium, Barium, Lanthan und Cer	81
11 Experimentelle Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten $B(E2, 0^+ \rightarrow 2^+)$ und zugehörige Kerndeformationen β^2	87
12 Bestimmung von $\delta(\beta^2)_{\text{exp}}$ aus den relativen Volumeneffekten	89
13 Zusammenstellung experimenteller und theoretischer Deformationsparameter β^2 für die stabilen (geraden) Xenon-Isotope	90
14 Zusammenstellung experimenteller Kerndeformationen für (g,g)-Kerne mit $Z=44\dots 62$	93
15 Beiträge der einzelnen s-Elektronen zur totalen Wahrscheinlichkeitsdichte $ \psi(0) ^2$ für die Konfigurationen Xe I, $5p^5 6s$, $5p^5 5d$, $5p^5 6p$ und $5p^5 7p$	103
16 Totale Wahrscheinlichkeitsdichte $ \psi(0) ^2$ für die $5p^5 6s$ -Terme und einige $5p^5 6p$ -Terme nach Berücksichtigung von intermediärer Kopplung und Konfigurationsmischung	105

7.4 Figurenverzeichnis

Figur	Seite
1 Ausschnitt aus dem Xenon I-Termschema	10
2 Schnitt durch die Hohlkathoden-Entladungslampe	24
3 Versuchsaufbau für die photoelektrische Hyperfeinstruktur-Registrierung (schematisch)	27
4 Beispiel für eine Anpassung	31
5 Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda=7887\text{\AA}$	34
6 Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda=8231\text{\AA}$	34
7 Überlagerte Hfs-Meßkurve der Linie Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$	35
8 King-Diagramm für die Xenon I-Linien $\lambda=7887\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$	57
9 King-Diagramm für die Xenon I-Linien $\lambda=8206\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$	57
10 King-Diagramm für die Xenon I-Linien $\lambda=8231\text{\AA}$ und $\lambda=9799\text{\AA}$	58
11 King-Diagramm für die Xenon I-Linie $\lambda=9799\text{\AA}$ und die Barium II-Resonanzlinie $\lambda=4934\text{\AA}$	62
12 Vergleich der experimentellen und theoretischen ISV-Konstanten	77
13 Vergleich der Änderungen des mittleren quadratischen Ladungsradius isotoner Nuklide von Xenon, Cäsium, Barium und Cer	82
14 Deformation von (g,g)-Kernen mit $Z=44\dots 62$	95

7.5 Literaturverzeichnis

- AB 61 O. Almén, G. Bruce : Nucl. Inst. Meth. 11,
257 (1961)
- Bab 63 F.A. Babushkin : Sov. Phys. JETP 17, 1118 (1963)
- BGZ 67 K. Bruchhausen, S. Gebauer, U.v.Zahn :
Z. Naturf. 22a, 969 (1967)
- BK 51 P. Brix, H. Kopfermann : Festschr. Akad. Wiss.
Göttingen, math.-physik. Klasse, S. 17 (1951)
- BK 58 P. Brix, H. Kopfermann : Rev. Mod. Phys. 30,
517 (1958)
- BK 71 D.C. Bishop, W.H. King : J. Physics B 4, 1798(1971)
- BKR 52 A. Bohr, J. Koch, E. Rasmussen :
Ark. Fysik 4, 455 (1952)
- Bod 53 A.R. Bodmer : Proc. Phys. Soc. A 66, 1041 (1953)
- Bod 58 A.R. Bodmer : Nucl. Phys. 9, 371 (1958/59)
- Bod 60 A.R. Bodmer : Nucl. Phys. 21, 347 (1960)
- Bre 58 G. Breit : Rev. Mod. Phys. 30, 507 (1958)
- Bri 68 D. Brinkmann : Helv. Phys. Acta 41, 367 (1968)
- Bro 45 E.K. Broch : Arch. Math. Naturvidensk. 48,
25 (1945)
- Bun 67 G.G. Bunatyan : Sov. J. Nucl. Phys. 4, 502 (1967)
- CH 72 A. Christy, O. Häusser : Nucl. Data Tables 11,
281 (1972)
- Cha 72 R.J. Champeau : Physica 62, 209 (1972)
- EH 69 M. Elbel, H. Hühnermann : J. Physique 30,
C1-41(1969)
- EK 69 R.P. Edwin, W.H. King : J. Physics B 2, 260(1969)
- Elt 61 L.R.B. Elton : Nuclear Sizes, London 1961
- EV 70 C.W.E. van Eijk, M.J.C. Visscher :
Phys. Lett. 33B, 349 (1970)

- FC 69 G.H. Fuller, V.W. Cohen : Nucl. Data Tables 5,
433 (1969)
- FH 69 W. Fischer, H. Hühnermann : J. Physique 30,
C1-59 (1969)
- FHH 73 W. Fischer, M. Hartmann, H. Hühnermann, H. Vogg :
erscheint demnächst in Z. Physik
- FHK 70 W. Fischer, H. Hühnermann, G. Krömer, H.J. Schäfer:
Verhandl. DPG(VI) 5, 359 (1970)
- FHK 71 W. Fischer, H. Hühnermann, G. Krömer, H.J. Schäfer:
Third Conference on Atomic Spectroscopy (EGAS),
Reading 1971
- FHM 73 W. Fischer, H. Hühnermann, K. Mandrek :
Verhandl. DPG(VI) 8, 612 (1973)
- FM 61 W.L. Faust, M.N. McDermott : Phys. Rev. 123,
198(1961)
- For 53 K.W. Ford : Phys. Rev. 90, 29 (1953)
- Fra 62 E.E. Fradkin : Sov. Phys. JETP 15, 550 (1962)
- Ger 69 S. Gerstenkorn : C. R. Acad. Sc. Paris 268B, 1636
(1969)
- GS 68 A.F. Golovin, A.R. Striganov : Sov. Phys. Uspekhi
10, 658 (1968)
- HE 30 D.S. Hughes, C. Eckart : Phys. Rev. 36, 694 (1930)
- Her 61 G. Hertz : Lehrbuch der Kernphysik, Bd. II,
Hanau 1961
- Hil 57 D.L. Hill : in Handbuch d. Physik, Bd. 39, 178,
Berlin etc. 1957
- HRH 56 B. Hahn, D.G. Ravenhall, R. Hofstadter :
Phys. Rev. 101, 1131 (1956)
- Hüh 63 H. Hühnermann : Diplomarbeit, Marburg 1963
- Hüh 67a H. Hühnermann : Dissertation, Marburg 1967
- Hüh 67b H. Hühnermann : J. Physique 28, C2-260 (1967)
- Hüh 71 H. Hühnermann : Habilitationsschrift, Marburg 1971

- Hum 52 W. Humbach : Z. Physik 133, 589 (1952)
- HW 67 H. Hühnermann, H. Wagner : Z. Physik 199, 239 (1967)
- HW 68 H. Hühnermann, H. Wagner : Z. Physik 216, 28 (1968)
- JC 70a D.A. Jackson, M.C. Coulombe :
C. R. Acad. Sc. Paris 270B, 1607 (1970)
- JC 70b D.A. Jackson, M.C. Coulombe :
Second Conference on Atomic Spectroscopy (EGAS),
Hannover 1970
- JC 71 D.A. Jackson, M.C. Coulombe :
C. R. Acad. Sc. Paris 272B, 114 (1971)
- JC 72 D.A. Jackson, M.C. Coulombe :
Proc. Roy. Soc. London A 327, 137 (1972)
- JD 48 P. Jacquinet, Ch. Dufour :
J. Recherche C.N.R.S. 6, 91 (1948)
- Jok 69 T. Jokić: Ninth Int. Conference on Phenomena in
Ionized Gases, Bukarest 1969
- KBP 70 P.F. Kenealy, G.B. Beard, K. Parsons :
Phys. Rev. C 2, 2009 (1970)
- KDS 58 J. Koch, R.H.V.M. Dawton, M.L. Smith, W. Walcher:
Electromagnetic Isotope Separators and Applications
of Electromagnetically Enriched Isotopes, Amsterdam
1958
- Kin 63 W.H. King : J. Opt. Soc. Am. 53, 638 (1963)
- KKS 66 W.H. King, H.G. Kuhn, D.N. Stacey :
Proc. Roy. Soc. London A 296, 24 (1966)
- KM 67 V.P. Krainov, M.A. Mikulinskii :
Sov. J. Nucl. Phys. 4, 665 (1967)
- Kop 56 H. Kopfermann : Kernmomente, Frankfurt, 2.Aufl. 1956
- KR 50 J. Koch, E. Rasmussen : Phys. Rev. 77, 722 (1950)
- Kuh 69 H.G. Kuhn : Atomic Spectra, London 1969

- KW 71 W.H. King, M. Wilson : Phys. Lett. 37A, 109 (1971)
- Ler 65 J. Lerner : Nucl. Inst. Meth. 38, 116 (1965)
- LHP 67 C.M. Lederer, J.M. Hollander, I. Perlman :
Table of Isotopes, New York etc., 6th edit. 1967
- Lib 68 S. Liberman : C. R. Acad. Sc. Paris 266B, 236
(1968)
- Lib 69 S. Liberman : J. Physique 30, 53 (1969)
- Lib 71 S. Liberman : J. Physique 32, 867 (1971)
- Luc-55 T. Lucretius Carus (gest. 55 v. Chr.) :
De rerum natura, liber secundus;
zitiert nach E. Hunger :
Von Demokrit bis Heisenberg, Braunschweig 1964
- Man 72 K. Mandrek : Dissertation, Marburg 1972
- Mig 64 A.B. Migdal : Nucl. Phys. 57, 29 (1964)
- Moo 58 Ch.E. Moore : Atomic Energy Levels, Vol. III,
Washington 1958
- Mos 57 S.A. Moszkowski : in Handbuch d. Physik, Bd. 39,
411, Berlin etc. 1957
- MPS 63 E. Marshalek, L.W. Person, R.K. Sheline :
Rev. Mod. Phys. 35, 108 (1963)
- MSB 69 M.A.J. Mariscotti, G. Scharff-Goldhaber, B. Buck :
Phys. Rev. 178, 1864 (1969)
- MSW 71 G. Müller, D. Skrok, R. Winkler : Optik 32,
410 (1971)
- MTE 60 A.S. Meligy, S. Tadros, M.A. El-Wahab :
Nucl. Phys. 16, 99 (1960)
- Nie 50 A.O. Nier : Phys. Rev. 79, 450 (1950)
- PAH 58 G.F. Pieper, C.E. Anderson, N.P. Heydenburg :
Bull. Am. Phys. Soc. 3, 38 (1958)
- Rac 42 G. Racah : Phys. Rev. 61, 537 (1942)
- RB 72 C.K. Ross, R.K. Bhaduri : Nucl. Phys. A196,
369 (1972)

- RS 71 B.S. Reehal, R.A. Sorensen : Nucl. Phys. A161,
385 (1971)
- Sch 70 H.J. Schäfer : Diplomarbeit, Marburg 1970
- SG 65 P.H. Stelson, L. Grodzins : Nucl. Data A 1,
21 (1965)
- Sor 66 R.A. Sorensen : Phys. Lett. 21, 333 (1966)
- SS 73 J.D. Silver, D.N. Stacey :
Proc. Roy. Soc. London A 332, 139 (1973)
- Sta 66 D.N. Stacey : Rep. Progr. Phys. 29, 171 (1966)
- Sto 59 A.P. Stone : Proc. Phys. Soc. 74, 424 (1959)
- US 66 R.A. Uher, R.A. Sorensen : Nucl. Phys. 86,
1 (1966)
- Vet 70a R. Vetter : Phys. Lett. 31A, 559 (1970)
- Vet 70b R. Vetter : Thèse, Orsay 1970
- Vet 72 R. Vetter : Phys. Lett. 42A, 231 (1972)
- Vin 39 J.P. Vinti : Phys. Rev. 56, 1120 (1939)
- WG 71 A.H. Wapstra, N.B. Gove : Nucl. Data Tables 9,
267 (1971)
- WHF 53 L. Wilets, D.L. Hill, K.W. Ford :
Phys. Rev. 91, 1488 (1953)
- Wil 68 M. Wilson : Phys. Rev. 176, 58 (1968)
- WW 69 C.S. Wu, L. Wilets : Ann. Rev. Nucl. Sci. 19,
527 (1969)

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, aus Messungen der Isotopieverschiebung Aussagen über die Kernstruktur der stabilen Xenon-Isotope zu gewinnen. Dazu wurde mit Hilfe eines photoelektrisch registrierenden Fabry-Pérot-Interferometers die Hyperfeinstruktur von vier Spektrallinien des Xenon I-Spektrums an Gemischen aus hoch angereicherten Isotopenproben gemessen. Um die Isotopieverschiebung der selteneren Xenon-Isotope untersuchen zu können, war es nötig, ein geeignetes Verfahren zur Präparation und zum Betrieb einer Lichtquelle zu entwickeln, die mit geringen Substanzmengen ($0,5\mu\text{g}$ bis $1\mu\text{g}$) elektromagnetisch angereicherter Xenon-Isotope arbeitet. Damit konnten die Messungen auch auf die Isotope ^{124}Xe und ^{126}Xe (natürliche Isotopenhäufigkeit 0,096% bzw. 0,09%) ausgedehnt werden, deren Hyperfeinstruktur bei Beginn der Arbeit noch nicht untersucht war.

Die Meßergebnisse für die Isotopieverschiebung aller stabilen Xenon-Isotope in den vier untersuchten Spektrallinien wurden über ein Ausgleichsverfahren gemittelt, wobei ausgenutzt wurde, daß die Isotopieverschiebung atomkern- und hüllenabhängige Parameter enthält, die jeweils für ein bestimmtes Isotopenpaar bzw. für eine bestimmte Spektrallinie konstant sein müssen.

Zur Auswertung der Messungen hinsichtlich der atomkernabhängigen Parameter ist die Kenntnis der Masseneffekte erforderlich. Drei verschiedene Methoden zur Abschätzung des spezifischen Masseneffekts werden diskutiert. Durch Vergleich der Änderung des mittleren quadratischen Kernladungsradius isotoner Nuklide von Xenon und seinen Nachbar-elementen kann ein plausibler Wert für den Masseneffekt in den Xenon-Spektrallinien angegeben werden. Nach Abzug dieses Masseneffekts von den ausgeglichenen Meßwerten ergeben sich folgende Volumeneffekte:

Isotopen- paar	Volumeneffekt für den Übergang Xe I, $\lambda=9799\text{\AA}$ $\Delta v_{VE}^{(A,A')}/\text{mK}$
A, A'	
124, 126	-2,2(2)
126, 128	-1,9(2)
128, 129	+0,7(2)
128, 130	-1,5(2)
130, 131	+1,6(3)
130, 132	-1,0(3)
132, 134	-1,5(3)
134, 136	-2,7(3)

Es kann gezeigt werden, daß sich die unregelmäßigen Änderungen des Volumeneffekts der geraden Xenon-Isotope auf entsprechende Änderungen der Kerndeformation dieser Isotope zurückführen lassen. Es wird ein Verfahren zur Bestimmung des Deformationsparameters β^2 angegeben, bei dem nicht von der absoluten Größe des Volumeneffekts, sondern nur von den relativen Volumeneffekten Gebrauch gemacht wird. Durch Anpassung an drei Deformationswerte, die aus gemessenen Quadrupolübergangswahrscheinlichkeiten ermittelt wurden, lassen sich aus der Isotopieverschiebung der Xenon-Isotope folgende Deformationen bestimmen:

Isotop	Deformationsparameter β^2
^{124}Xe	0,0485
^{126}Xe	0,042
^{128}Xe	0,035
^{130}Xe	0,027
^{132}Xe	0,017
^{134}Xe	0,009
^{136}Xe	0,005

Die Ergebnisse werden mit theoretischen Voraussagen über die Kerndeformation sowie mit experimentellen Werten für die isotonen Nuklide der Nachbarelemente verglichen. Schließlich wird das starke odd-even-staggering der beiden ungeraden Xenon-Isotope diskutiert. Unter der Annahme, daß das anomale Verhalten der ungeraden Isotope als reiner Deformationseffekt gedeutet werden darf, wird die Kerndeformation der Isotope ^{129}Xe und ^{131}Xe abgeschätzt.

Lebenslauf

Am 27. Dezember 1941 wurde ich, Hans-Jürgen Schäfer, als Sohn des Verwaltungsbeamten Hermann Schäfer und seiner Ehefrau Auguste, geborene Faust, in Marburg/Lahn geboren.

Von 1949 bis 1953 besuchte ich die Volksschule in Marburg. Anschließend trat ich in das Gymnasium für Jungen (Martin-Luther-Schule) in Marburg ein, wo ich am 3. März 1962 die Reifeprüfung ablegte.

Nach einem zweijährigen Wehrdienst bei der Bundeswehr begann ich im Sommersemester 1964 an der Philipps-Universität Marburg das Studium der Physik. Die Diplom-Hauptprüfung bestand ich im Februar 1970. Anschließend übernahm ich im Fachbereich Physik der Philipps-Universität die vorliegende Arbeit.

Meine akademischen Lehrer waren in Physik die Herren Professoren

Blume, Bock, Cappeller, Doebner, Elbel, Grawert,
Großmann, Kamke, Ludwig, Madelung, Schröter, Suchy,
Walcher, Wolter und Zickendraht;

in Mathematik die Herren Professoren

Avakumović, Richert, H.A. Schmidt und Wirsing;

in Chemie und Kernchemie die Herren Professoren

Dimroth, Mahr, Pfeil und Starke.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. W. Walcher, sei an dieser Stelle für sein förderndes Interesse gedankt.

Herrn Prof. Dr. W. Fischer und Herrn Prof. Dr. H. Hühnermann danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit, für fortwährende Unterstützung und klärende Diskussionen. Desgleichen bin ich Herrn Prof. Dr. M. Elbel für sein Interesse an dieser Arbeit verpflichtet.

Mein Dank gilt schließlich Herrn Dipl.-Phys. G. Krömer und Herrn F. Lücke für die Herstellung der angereicherten Isotopenproben, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

